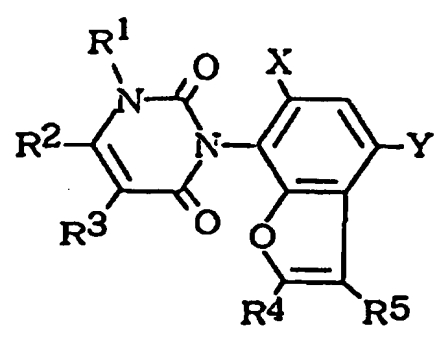




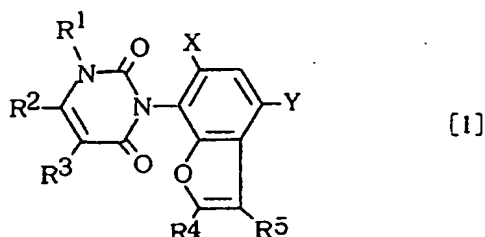
PCT

特許協力条約に基づいて公開された国際出願

<p>(51) 国際特許分類6 C07D 405/04, A01N 43/54</p>	<p>A1</p>	<p>(11) 国際公開番号 WO97/29105</p> <p>(43) 国際公開日 1997年8月14日 (14.08.97)</p>		
<table border="1"> <tr> <td data-bbox="186 367 828 987"> <p>(21) 国際出願番号 PCT/JP97/00320</p> <p>(22) 国際出願日 1997年2月7日 (07.02.97)</p> <p>(30) 優先権データ 特願平8/48327 1996年2月9日 (09.02.96)</p> <p>(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について) クミアイ化学工業株式会社 (KUMIAI CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] イハラケミカル工業株式会社 (IHARA CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] 〒110 東京都台東区池之端1丁目4番26号 Tokyo, (JP)</p> <p>(72) 発明者; および (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ) 宮崎雅弘 (MIYAZAKI, Masahiro) [JP/JP] 出口武司 (DEGUCHI, Takeshi) [JP/JP] 武樋隆芳 (TAKEHI, Takayoshi) [JP/JP] 田丸雅敏 (TAMARU, Masatoshi) [JP/JP] 〒437-12 静岡県磐田郡福田町塩新田408番地の1 株式会社 ケイ・アイ研究所内 Shizuoka, (JP) 山地充洋 (YAMAJI, Yoshihiro) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂1809番地 Shizuoka, (JP)</p> </td> <td data-bbox="828 367 1485 987"> <p>花井 涼 (HANAI, Ryo) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町西方1198番地の2 Shizuoka, (JP) 魚津壮太 (UOTSU, Souta) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂3353番地 Shizuoka, (JP) 佐土原英雄 (SADOHARA, Hideo) [JP/JP] 〒352 埼玉県新座市堀之内2丁目9番地の3 Saitama, (JP)</p> <p>(74) 代理人 弁理士 山本量三, 外 (YAMAMOTO, Ryoza et al.) 〒101 東京都千代田区神田東松下町38番地 島本鋼業ビル Tokyo, (JP)</p> <p>(81) 指定国 AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CU, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, GB, GE, HU, IL, IS, JP, KE, KG, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, TJ, TM, TR, TT, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ARIPO特許 (KE, LS, MW, SD, SZ, UG), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, ML, MR, NE, SN, TD, TG).</p> <p>添付公開書類 国際調査報告書</p> </td> </tr> </table>			<p>(21) 国際出願番号 PCT/JP97/00320</p> <p>(22) 国際出願日 1997年2月7日 (07.02.97)</p> <p>(30) 優先権データ 特願平8/48327 1996年2月9日 (09.02.96)</p> <p>(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について) クミアイ化学工業株式会社 (KUMIAI CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] イハラケミカル工業株式会社 (IHARA CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] 〒110 東京都台東区池之端1丁目4番26号 Tokyo, (JP)</p> <p>(72) 発明者; および (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ) 宮崎雅弘 (MIYAZAKI, Masahiro) [JP/JP] 出口武司 (DEGUCHI, Takeshi) [JP/JP] 武樋隆芳 (TAKEHI, Takayoshi) [JP/JP] 田丸雅敏 (TAMARU, Masatoshi) [JP/JP] 〒437-12 静岡県磐田郡福田町塩新田408番地の1 株式会社 ケイ・アイ研究所内 Shizuoka, (JP) 山地充洋 (YAMAJI, Yoshihiro) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂1809番地 Shizuoka, (JP)</p>	<p>花井 涼 (HANAI, Ryo) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町西方1198番地の2 Shizuoka, (JP) 魚津壮太 (UOTSU, Souta) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂3353番地 Shizuoka, (JP) 佐土原英雄 (SADOHARA, Hideo) [JP/JP] 〒352 埼玉県新座市堀之内2丁目9番地の3 Saitama, (JP)</p> <p>(74) 代理人 弁理士 山本量三, 外 (YAMAMOTO, Ryoza et al.) 〒101 東京都千代田区神田東松下町38番地 島本鋼業ビル Tokyo, (JP)</p> <p>(81) 指定国 AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CU, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, GB, GE, HU, IL, IS, JP, KE, KG, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, TJ, TM, TR, TT, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ARIPO特許 (KE, LS, MW, SD, SZ, UG), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, ML, MR, NE, SN, TD, TG).</p> <p>添付公開書類 国際調査報告書</p>
<p>(21) 国際出願番号 PCT/JP97/00320</p> <p>(22) 国際出願日 1997年2月7日 (07.02.97)</p> <p>(30) 優先権データ 特願平8/48327 1996年2月9日 (09.02.96)</p> <p>(71) 出願人 (米国を除くすべての指定国について) クミアイ化学工業株式会社 (KUMIAI CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] イハラケミカル工業株式会社 (IHARA CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) [JP/JP] 〒110 東京都台東区池之端1丁目4番26号 Tokyo, (JP)</p> <p>(72) 発明者; および (75) 発明者/出願人 (米国についてのみ) 宮崎雅弘 (MIYAZAKI, Masahiro) [JP/JP] 出口武司 (DEGUCHI, Takeshi) [JP/JP] 武樋隆芳 (TAKEHI, Takayoshi) [JP/JP] 田丸雅敏 (TAMARU, Masatoshi) [JP/JP] 〒437-12 静岡県磐田郡福田町塩新田408番地の1 株式会社 ケイ・アイ研究所内 Shizuoka, (JP) 山地充洋 (YAMAJI, Yoshihiro) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂1809番地 Shizuoka, (JP)</p>	<p>花井 涼 (HANAI, Ryo) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町西方1198番地の2 Shizuoka, (JP) 魚津壮太 (UOTSU, Souta) [JP/JP] 〒439 静岡県小笠郡菊川町加茂3353番地 Shizuoka, (JP) 佐土原英雄 (SADOHARA, Hideo) [JP/JP] 〒352 埼玉県新座市堀之内2丁目9番地の3 Saitama, (JP)</p> <p>(74) 代理人 弁理士 山本量三, 外 (YAMAMOTO, Ryoza et al.) 〒101 東京都千代田区神田東松下町38番地 島本鋼業ビル Tokyo, (JP)</p> <p>(81) 指定国 AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CU, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, GB, GE, HU, IL, IS, JP, KE, KG, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, TJ, TM, TR, TT, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ARIPO特許 (KE, LS, MW, SD, SZ, UG), ユーラシア特許 (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), 欧州特許 (AT, BE, CH, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI特許 (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, ML, MR, NE, SN, TD, TG).</p> <p>添付公開書類 国際調査報告書</p>			
<p>(54) Title: BENZOFURAN-7-YLURACIL DERIVATIVES AND HERBICIDES</p> <p>(54) 発明の名称 ベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体及び除草剤</p> <div style="text-align: center;">  <p>(1)</p> </div> <p>(57) Abstract Benzofuran-7-yluracil derivatives represented by general formula (1) and herbicides containing the same as the active ingredient (1), wherein X and Y represent each hydrogen, halogeno, etc.; R¹ represents hydrogen, alkyl, etc.; R² represents haloalkyl, etc.; R³ represents hydrogen, halogeno, etc.; and R⁴ and R⁵ represent each independently hydrogen, alkyl, haloalkyl, halogeno, cyano, phenyl, benzyl, nitro, etc. These compounds exert excellent herbicidal effects on various upland weeds such as broadleaf weeds, grass weeds and perennial or annual cyperaceous weeds over a wide range of from the pre-sprouting period to the growing period. Also, perennial and annual lowland weeds can be controlled thereby. Moreover, the herbicides are highly safe for crops, in particular, rice, wheat, barley, grain sorghum, corn, soybean, cotton, beet, etc.</p>				

(57) 要約

一般式 [1]



(式中、X、Yは水素原子、ハロゲン原子等を表し、R¹は水素原子、アルキル基等を表し、R²はハロアルキル基等を表し、R³は水素原子、ハロゲン原子等を表し、R⁴及びR⁵はそれぞれ独立して、水素原子、アルキル基、ハロアルキル基、ハロゲン原子、シアノ基、フェニル基、ベンジル基、ニトロ基等を表す。)で示されるベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体及びこれを有効成分とする除草剤。

一般式 [1] で表される本発明の化合物は、畑地において問題となる種々の広葉雑草、イネ科雑草、及び多年生若しくは1年生カヤツリグサ科雑草などに、発芽前から生育期の広い範囲にわたって優れた除草効果を発揮する。また、水田に発生する一年生雑草及び多年生雑草を防除することもできる。

又、本発明の除草剤は作物に対する安全性も高く、特にイネ、コムギ、オオムギ、グレインソルガム、トウモロコシ、ダイズ、ワタ、テンサイ等に対して高い安全性を示す。

情報としての用途のみ

PCTに基づいて公開される国際出願をパンフレット第一頁にPCT加盟国を特定するために使用されるコード

AL	アルバニア	ES	エストニア	LR	リベリア	RU	ロシア連邦
AM	アルメニア	FI	フィンランド	LS	レソト	SD	スーダン
AT	オーストリア	FR	フランス	LT	リトアニア	SE	スウェーデン
AU	オーストラリア	GB	イギリス	LU	ルクセンブルグ	SG	シンガポール
AZ	アゼルバイジャン	GA	ガボン	LV	ラトヴィア	SI	スロベニア
BB	バルバドス	GE	グルジア	MC	モナコ	SK	スロバキア共和国
BE	ベルギー	GN	ギニア	MD	モルドバ	SS	ス威士ランド
BG	ブルガリア	GR	ギリシャ	MG	マダガスカル	ST	サントメ・プリンセペ
BJ	ベナン	GU	グアテマラ	MK	マケドニア	TD	チャド
BM	バハマ	HR	クロアチア	ML	マリ	TI	トルコ
BN	ブルネイ	HU	ハンガリー	MN	モンゴル	TM	トルクメニスタン
BO	ボリビア	IE	アイルランド	MR	モーリタニア	TT	トリニダード・トバゴ
BR	ブラジル	IT	イタリア	MW	マラウイ	UG	ウガンダ
BS	バハマ	JP	日本	MX	メキシコ	US	米国
BT	ブータン	KE	ケニア	NE	ニジェール	UZ	ウズベキスタン共和国
BV	バークレー	KR	韓国	NL	オランダ	VN	ベトナム
CA	カナダ	KG	キルギスタン	NZ	ニュージーランド	YU	ユーゴスラビア
CC	中央アフリカ共和国	KP	朝鮮民主主義人民共和国	NO	ノルウェー		
CD	コンゴ	KZ	カザフスタン	PL	ポーランド		
CF	中央アフリカ共和国	LA	ラオス	PT	ポルトガル		
CG	コンゴ	LI	リヒテンシュタイン	RO	ルーマニア		
CH	スイス	LU	ルクセンブルグ				
CI	コートジボワール	LV	ラトヴィア				
CM	カメルーン	MC	モナコ				
CN	中国	MD	モルドバ				
CO	コロンビア	ME	モンテネグロ				
CZ	チェコ	MG	マダガスカル				
DE	ドイツ	MH	マカオ				
DK	デンマーク	ML	マリ				

明細書

ベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体及び除草剤

〔技術分野〕

本発明は新規なベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体及びそれを有効成分とする除草剤に関するものである。

〔背景技術〕

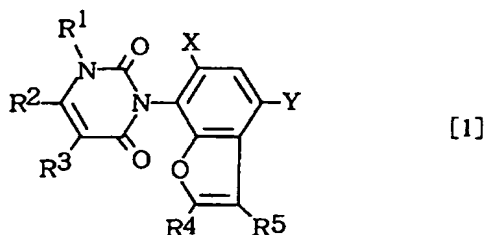
特開平5-262765号公報明細書、特開平5-25165号公報明細書にはある種のベンゾフラン誘導体が、特開昭63-156787号公報明細書にはある種のベンゾピラン誘導体及びベンゾフラン誘導体が、さらにヨーロッパ特許626962号公報明細書にはベンゾチオフェン誘導体及びベンゾフラン誘導体が除草剤の有効成分として用いられることが記載されている。

有用作物に対して使用される除草剤は、土壌又は茎葉に施用し、低薬量で十分な除草効果を示し、しかも作物・雑草間の選択性を発揮する薬剤であることが望まれる。しかしながら土壌処理に限らず、除草効果と作物・雑草間の選択性は、土壌の性質に影響され、施用後に作物に薬害を生ずることがある。これらの点で、上記文献中で開示されている化合物は必ずしも満足すべき物とは言い難い。

本発明者らはこのような状況に鑑み、除草効果と作物・雑草間の選択性を検討した結果、新規なベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体が、優れた除草効果と作物・雑草間の選択性を有することを見だし、本発明を完成した。

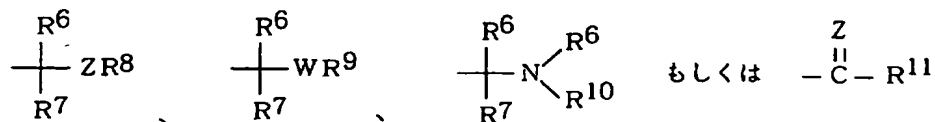
〔発明の開示〕

すなわち本発明は一般式〔1〕



〔式中、Xは水素原子又はハロゲン原子を表し、Yは水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシ基又はハロアルコキシ基を表し、R¹は水素原子、アルキル基、アミノ基又はハロアルキル基を表し、R²

はアルキル基又はハロアルキル基を表し、 R^3 は水素原子、ハロゲン原子、アルキル基又はハロアルキル基を表し、 R^4 及び R^5 はそれぞれ同一又は相異なり、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルケニルオキシ基、アルキニルオキシ基、アルコキシカルボニルアルコキシ基、アルキルチオ基、ハロアルキルチオ基、アルケニルチオ基、アルキニルチオ基、アルコキシカルボニルアルキルチオ基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、ハロゲン原子、ヒドロキシイミノアルキル基、ヒドロキシイミノハロアルキル基、アルコキシイミノアルキル基、アルコキシイミノハロアルキル基、アルキルイミノアルキル基、置換されていてもよいフェニルイミノアルキル基、ヒドラゾノアルキル基、アルキルヒドラゾノアルキル基、置換されていてもよいフェニルヒドラゾノアルキル基、シアノ基、（窒素原子に、同一又は相異なる水素原子、アルキル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、もしくは置換されていてもよいフェニル基が置換した）カルバモイル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいベンジル基、シアノアルキル基、カルバモイルアルキル基、チオシアノアルキル基、ニトロ基、ヒドロキシアミノ基、アルキル基により置換されていてもよいオキシラニル基、（窒素原子に、同一又は相異なる水素原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロアルキル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基もしくは置換されていてもよいベンゾイル基が置換した）アミノ基又は一般式



（式中、Zは酸素原子又は硫黄原子を表し、Wは基-SO-又は基-SO₂-を表し、 R^6 は水素原子又はアルキル基を表し、 R^7 は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシア

ルキル基又はアルキルチオアルキル基を表し、あるいはR⁶及びR⁷は互いに結合し、これらが結合している炭素原子と一緒に3～8員（炭素）環を形成することもできる。R⁸は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基、ジアルキルカルバモイルアルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、ハロアルキルカルボニル基、モノアルキルカルバモイル基、モノアルキルチオカルバモイル基、ジアルキルカルバモイル基、ジアルキルチオカルバモイル基又は置換されていてもよいベンゾイル基を表し、R⁹は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基又はジアルキルカルバモイルアルキル基を表し、R¹⁰は水素原子、アルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基又はハロアルキルカルボニル基を表し、R¹¹は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、アルキルチオアルキル基、置換されていてもよいフェニル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、置換されていてもよいベンジルオキシ基、置換されていてもよいフェノキシ基又は水酸基を表す。）で示される基を表す。]で示されるベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体及びそれを有効成分とする除草剤である。

なお、本明細書において、アルキル基、アルキルチオ基、アルコキシアルキル基、アルキルチオアルキル基、アルコキシカルボニルアルキルチオ基、アルキルイミノアルキル基、シアノアルキル基、カルバモイルアルキル基、チオシアノアルキル基、アルキル基により置換されていてもよいオキシラニル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基、ジアルキルカルバモイルアルキル基、ヒドロキシイミノアルキル基、アルコキシイミノアルキル基、置換されていてもよいフェニルイミノアルキル基、ヒドラゾノアルキル基、アルキルヒドラゾノアルキル基、置換されていてもよいフェニルヒドラゾノアルキル基及びアルキルスルホニル基のアルキルとは、炭素数1～6の直鎖又は分岐鎖状のアルキル基を示し、例えばメチル基、

エチル基、*n*-プロピル基、イソプロピル基、*n*-ブチル基、イソブチル基、*sec*-ブチル基、*t*-ブチル基、*n*-ペンチル基、イソペンチル基、ネオペンチル基、*n*-ヘキシル基、イソヘキシル基、3, 3-ジメチルブチル基等を挙げることができる。

ハロアルキル基、ハロアルキルスルホニル基、ハロアルキルカルボニル基、ヒドロキシイミノハロアルキル基及びアルコキシイミノハロアルキル基のハロアルキルとは、ハロゲン原子によって置換された炭素数1~4の直鎖又は分岐鎖状のアルキル基を示し、例えばクロロメチル基、ジフルオロメチル基、トリフルオロメチル基、ペンタフルオロエチル基等を挙げることができる。

ハロゲン原子とはフッ素原子、塩素原子、臭素原子、又はヨウ素原子を示す。

アルコキシ基、アルコキシアルキル基、アルコキシカルボニルアルコキシ基、アルコキシカルボニルアルキルチオ基、アルコキシイミノアルキル基、アルコキシイミノハロアルキル基及びアルコキシカルボニルアルキル基のアルコキシとは、炭素数1~6の直鎖又は分岐鎖状のアルコキシ基を示し、例えばメトキシ基、エトキシ基、*n*-プロポキシ基、イソプロポキシ基、*n*-ブトキシ基、イソブトキシ基、*sec*-ブトキシ基、*t*-ブトキシ基、*n*-ペンチルオキシ基、イソペンチルオキシ基、ネオペンチルオキシ基、*n*-ヘキシルオキシ基、イソヘキシルオキシ基、3, 3-ジメチルブトキシ基等を挙げることができる。

ハロアルコキシ基とはハロゲン原子によって置換された炭素数1~4の直鎖又は分岐鎖状のアルコキシ基を示し、例えばクロロメトキシ基、ジフルオロメトキシ基、トリフルオロメトキシ基、ペンタフルオロエトキシ基等を挙げることができる。

アシル基とは、炭素数1~6の直鎖又は分岐鎖状の脂肪族アシル基を示し、例えばホルミル基、アセチル基、プロピオニル基、ブチリル基、ピバロイル基等を挙げることができる。

アルケニル基、アルケニルオキシ基及びアルケニルチオ基のアルケニルとは炭素数2~6の直鎖又は分岐鎖状のアルケニル基を示し、例えばビニル基、プロペニル基、イソプロペニル基、ブテニル基、ペンテニル基、ヘキセニル基等を挙げることができる。

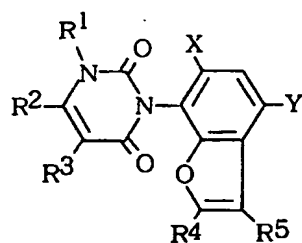
アルキニル基、アルキニルオキシ基及びアルキニルチオ基のアルキニルとは炭素数2～6の直鎖又は分岐鎖状のアルキニル基を示し、例えばエチニル基、プロピニル基、ブチニル基、ペンチニル基、ヘキシニル基、3,3-ジメチル-1-ブチニル基、4-メチル-1-ペンチニル基、3-メチル-1-ペンチニル基等を挙げることができる。


シクロアルキル基とは炭素数3～8のシクロアルキル基を示し、例えばシクロプロピル基、シクロヘキシル基等を挙げることができる。

置換されていてもよいフェニルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルイミノアルキル基、置換されていてもよいフェニルヒドラゾノアルキル基、置換されていてもよいフェノキシ基、置換されていてもよいベンジルオキシ基、置換されていてもよいベンゾイル基、置換されていてもよいフェニル基及び置換されていてもよいベンジル基におけるフェニル環は、ハロゲン原子、アルキル基、アルコキシ基、ハロアルキル基、ハロアルコキシ基、ニトロ基、シアノ基等の置換基で置換されたものも含む。







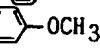


次に、本発明化合物の具体例を表1～表24に記載する。しかしながら、これらの化合物に限定されるものではない。なお、化合物番号は以後の記載において参照される。

(表 1)






化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
1	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	H	H	127-128
2	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	196-197
3	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	142-143
4	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	88-89
5	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	H	
6	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	H	1. 5375
7	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉ -i	H	1. 5358
8	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	H	168-172
9	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHBr ₂	H	126-128
10	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CBr ₃	H	測定不可
11	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHF ₂	H	
12	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OH	H	198-199
13	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	H	154-157
14	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCH ₃	H	1. 5389
15	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OC ₂ H ₅	H	1. 5379
16	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCOCH ₃	H	1. 5347
17	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCOC ₂ H ₅	H	
18	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCOCH ₃	H	
19	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCO- 	H	160-162
20	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SCH ₃	H	測定不可
21	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₃	H	209-211
22	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₂ H ₅	H	1. 5629
23	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₂ H ₅	H	212-215
24	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ N(CH ₃) ₂	H	
25	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ N(C ₂ H ₅) ₂	H	1. 5331
26	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	Cl	H	180-182
27	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	Br	H	







(表 2)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
28	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	H	193-194
29	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	H	測定不可
30	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇	H	測定不可
31	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇ -i	H	128-129
32	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CO- 	H	
33	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHO	H	180-183
34	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=NOH	H	
35	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=NOCH ₃	H	測定不可
36	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOH	H	263-266
37	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOCH ₃	H	176-178
38	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOC ₂ H ₅	H	
39	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NCH ₃	H	
40	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NNHCH ₃	H	
41	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	
42	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOH	H	267-268 (分解)
43	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOCH ₃	H	194-196
44	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₂ H ₅	H	1.5453
45	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₃ H ₇ -i	H	測定不可
46	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₅ H ₁₁	H	
47	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COO- 	H	
48	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOCH ₂ - 	H	
49	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH ₂	H	
50	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONHCH ₃	H	
51	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CON(CH ₃) ₂	H	
52	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONHC ₂ H ₅	H	
53	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
54	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
55	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
56	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
57	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	
58	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ - 	H	
59	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NO ₂	H	











(表 3)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	熔点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
60	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NH ₂	H	
61	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCH ₃	H	
62	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCH ₂ Cl	H	
63	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCF ₃	H	
64	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCO- 	H	
65	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CH ₃	H	
66	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CF ₃	H	
67	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CH ₂ Cl	H	
68	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CHF ₂	H	
69	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ - 	H	
70	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₃	181-183
71	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₂ H ₅	130-131
72	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₃ H ₇	1. 5287
73	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₃ H ₇ -i	
74	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₄ H ₉	1. 5398
75	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	- 	195-197
76	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH ₃	
77	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	Br	
78	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	Cl	157-160
79	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OH	97-100
80	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OCOCH ₃	168-170
81	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OCH ₃	
82	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OC ₂ H ₅	
83	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ SCH ₃	157-158
84	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ SO ₂ CH ₃	209-211
85	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ N(CH ₃) ₂	
86	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOH	217-220
87	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₃	1. 5440
88	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₂ H ₅	1. 5489
89	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₃ H ₇ -i	154-156
90	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₅ H ₁₁	1. 5299
91	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CHO	148-150
92	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=NOH	82-84



(表 4)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
93	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=NOCH ₃	1.5483
94	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CN	
95	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CONH ₂	102-105
96	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CONHCH ₃	
97	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CONHC ₂ H ₅	
98	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CON(CH ₃) ₂	90-93
99	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CONH- 	
100	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CONH- 	
101	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₃	138-140
102	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COC ₂ H ₅	1.5496
103	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₂ Cl	77-80
104	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCF ₃	
105	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CH ₃	
106	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CF ₃	
107	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CH ₂ Cl	
108	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CHF ₂	
109	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH(CH ₃)OH	
110	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOH	108-111
111	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOCH ₃	65-67
112	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOC ₂ H ₅	
113	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NCH ₃	
114	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NNHCH ₃	187-190
115	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=N- 	
116	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NNH- 	117-120
117	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CO- 	192-194
118	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ - 	
119	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NO ₂	測定不可
120	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NH ₂	
121	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CH ₃	
122	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CF ₃	
123	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CH ₂ Cl	
124	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CHF ₂	
125	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCH ₃	209-211


(表 5)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
126	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCF ₃	114-116 測定不可 1.5341 1.5229 1.5503 139-140 115-117
127	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCH ₂ Cl	
128	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO- 	
129	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO- 	
130	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO- 	
131	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO- 	
132	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ - 	
133	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ - 	
134	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ - 	
135	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ - 	
136	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₃	
137	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OH	
138	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OCOCH ₃	
139	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OCH ₃	
140	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOH	
141	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CHO	
142	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₃	
143	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOC ₃ H ₇ -i	
144	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH=NOCH ₃	
145	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH=NNHCH ₃	
146	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	Cl	
147	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₃	
148	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NOH	
149	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NOCH ₃	
150	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NNHCH ₃	
151	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NNH- 	
152	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COC ₂ H ₅	
153	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COC ₃ H ₇ -i	
154	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CO- 	
155	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	NO ₂	
156	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	NH ₂	
157	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	NHCOCH ₃	
158	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	NHSO ₂ CH ₃	











(表 6)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	熔点 (°C) 屈折率 n _D ²⁰
159	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	NHSO ₂ CF ₃	1.5362 103-104
160	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COO- 	
161	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₂ - 	
162	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CONHCH ₃	
163	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CON(CH ₃) ₂	
164	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CH ₃	
165	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₃	
166	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOCH ₃	
167	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CH ₂ OCH ₃	
168	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	CH ₃	
169	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	COCH ₃	172-174
170	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	COOCH ₃	
171	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	CH ₂ OCH ₃	
172	F	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	H	
173	F	Cl	C ₂ H ₅	CF ₃	H	CH ₃	H	
174	F	Cl	C ₃ H ₇	CF ₃	H	CH ₃	H	
175	F	Cl	CH ₂ Cl	CF ₃	H	CH ₃	H	
176	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	CH ₃	H	
177	F	Cl	H	CF ₃	CH ₃	CH ₃	H	
178	F	Cl	H	CF ₃	CH ₂ Cl	CH ₃	H	
179	F	Cl	H	CF ₃	Cl	CH ₃	H	154-155
180	F	Cl	H	CF ₃	Br	CH ₃	H	
181	F	Cl	H	CH ₃	H	CH ₃	H	
182	F	Cl	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	
183	F	Cl	CHF ₂	CH ₃	H	CH ₃	H	
184	F	Cl	H	CH ₃	Cl	CH ₃	H	
185	F	Cl	H	CH ₂ Cl	H	CH ₃	H	
186	F	Cl	CH ₃	CH ₂ Cl	H	CH ₃	H	
187	F	Cl	H	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
188	F	Cl	H	CF ₃	CH ₃	C ₂ H ₅	H	
189	F	Cl	H	CF ₃	Cl	C ₂ H ₅	H	
190	F	Cl	CH ₂ Cl	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
191	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	


(表 7)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
192	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₃	
193	F	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
194	F	Cl	CH ₃	CF ₃	Cl	C ₂ H ₅	H	
195	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	H	H	142-144
196	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	206-207
197	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	159-160
198	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	159-161
199	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	H	
200	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	H	101-102
201	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉ -i	H	129-131
202	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	H	200-202
203	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHBr ₂	H	
204	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CBr ₃	H	
205	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHF ₂	H	
206	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OH	H	179-181
207	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	H	85-86
208	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCH ₃	H	141-143
209	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OC ₂ H ₅	H	93-96
210	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCOCH ₃	H	135-138
211	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCC ₂ H ₅	H	
212	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCOCH ₃	H	
213	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ OCO- 	H	180-182
214	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SCH ₃	H	
215	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₃	H	
216	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₂ H ₅	H	
217	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₂ H ₅	H	
218	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ NHCH ₃	H	
219	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ N(C ₂ H ₅) ₂	H	1. 5420
220	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	Cl	H	
221	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	Br	H	
222	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	H	181-182
223	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	H	
224	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇	H	











(表 8)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
225	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇ -i	H	233-235 1.5416
226	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CO- 	H	
227	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHO	H	
228	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OCH ₃) ₂	H	
229	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=NOH	H	
230	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=NOCH ₃	H	179-181
231	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=NNHCH ₃	H	測定不可
232	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOH	H	172-176
233	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOCH ₃	H	
234	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NOC ₂ H ₅	H	
235	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NCH ₃	H	
236	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=NNHCH ₃	H	
237	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CN	H	270-273 137-138 116-117 144-145
238	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOH	H	
239	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOCH ₃	H	
240	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₂ H ₅	H	
241	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₃ H ₇ -i	H	
242	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOC ₅ H ₁₁	H	273-275 287-288 測定不可 225-226 289-290 294-296 >300 254-256
243	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COO-  -OCH ₃	H	
244	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COOCH ₂ - 	H	
245	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH ₂	H	
246	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONHCH ₃	H	
247	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CON(CH ₃) ₂	H	254-256 177-180
248	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONHC ₂ H ₅	H	
249	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
250	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
251	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
252	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	177-180
253	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CONH- 	H	
254	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	-  -Cl	H	
255	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ - 	H	
256	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NO ₂	H	



(表 9)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
257	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NH ₂	H	
258	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCH ₃	H	
259	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCH ₂ Cl	H	
260	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHCOCF ₃	H	
261	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CH ₃	H	
262	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CF ₃	H	
263	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CH ₂ Cl	H	
264	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NHSO ₂ CHF ₂	H	
265	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₃	152-153
266	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₂ H ₅	141-142
267	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₃ H ₇	1. 5461
268	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₃ H ₇ -i	
269	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C ₄ H ₉	1. 5557
270	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃		測定不可
271	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH ₃	
272	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	Br	1. 5632
273	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	Cl	
274	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OH	
275	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OCOCH ₃	
276	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OCH ₃	
277	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OC ₂ H ₅	
278	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ SCH ₃	
279	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ SO ₂ CH ₃	
280	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ N(CH ₃) ₂	
281	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOH	
282	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₃	
283	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₂ H ₅	
284	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₃ H ₇ -i	
285	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOC ₅ H ₁₁	
286	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CHO	
287	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=NOH	
288	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=NOCH ₃	
289	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₃	172-174

(表 10)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
290	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COC ₂ H ₅	248-250
291	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₂ Cl	
292	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCF ₃	
293	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CH ₃	
294	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CF ₃	
295	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CH ₂ Cl	
296	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ CHF ₂	
297	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH(CH ₃)OH	
298	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOH	
299	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOCH ₃	167-168
300	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₃)=NOC ₂ H ₅	203-205
301	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CO- 	
302	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SO ₂ -  -Cl	174-175
303	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NO ₂	
304	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NH ₂	134-136
305	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHOH	
306	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CH ₃	290-292
307	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CF ₃	
308	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CH ₂ Cl	
309	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ CHF ₂	
310	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCH ₃	
311	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCF ₃	
312	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCOCH ₂ Cl	
313	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO- 	
314	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO-  -CH ₃	
315	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO-  -Cl	
316	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHCO-  -OCH ₃	290-292
317	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ - 	
318	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ -  -CH ₃	
319	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ -  -Cl	
320	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHSO ₂ -  -OCH ₃	
321	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₃	
322	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OH	





(表 11)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
323	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OCOCH ₃	122-124
324	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OCH ₃	
325	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CHO	
326	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOH	
327	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₃	
328	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOC ₃ H _{7-i}	
329	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	Cl	
330	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₃	1. 5662
331	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NOH	102-105
332	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	C(CH ₃)=NOCH ₃	1. 5442
333	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COC ₂ H ₅	測定不可
334	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COC ₃ H _{7-i}	
335	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CO- 	
336	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ SCH ₃	
337	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ SO ₂ CH ₃	
338	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CONHCH ₃	
339	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CON(CH ₃) ₂	
340	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CONH- 	
341	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CH ₃	
342	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₃	
343	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOCH ₃	1. 5449 188-191
344	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CH ₂ OCH ₃	
345	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H _{7-i}	CH ₃	
346	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H _{7-i}	COCH ₃	
347	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H _{7-i}	COOCH ₃	
348	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H _{7-i}	CH ₂ OCH ₃	
349	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	COCH ₃	
350	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	Br	
351	H	Cl	H	CF ₃	H	CH ₃	H	
352	H	Cl	C ₂ H ₅	CF ₃	H	CH ₃	H	
353	H	Cl	C ₃ H ₇	CF ₃	H	CH ₃	H	
354	H	Cl	CH ₂ Cl	CF ₃	H	CH ₃	H	
355	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	CH ₃	H	


(表 1 2)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
356	H	Cl	H	CF ₃	CH ₃	CH ₃	H	
357	H	Cl	H	CF ₃	CH ₂ Cl	CH ₃	H	
358	H	Cl	H	CF ₃	Cl	CH ₃	H	
359	H	Cl	H	CF ₃	Br	CH ₃	H	
360	H	Cl	H	CH ₃	H	CH ₃	H	
361	H	Cl	CH ₃	CH ₃	H	CH ₃	H	
362	H	Cl	CHF ₂	CH ₃	H	CH ₃	H	
363	H	Cl	H	CH ₃	Cl	CH ₃	H	
364	H	Cl	H	CH ₂ Cl	H	CH ₃	H	
365	H	Cl	CH ₃	CH ₂ Cl	H	CH ₃	H	
366	H	Cl	H	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
367	H	Cl	H	CF ₃	CH ₃	C ₂ H ₅	H	
368	H	Cl	H	CF ₃	Cl	C ₂ H ₅	H	
369	H	Cl	CH ₂ Cl	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
370	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
371	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₃	
372	H	Cl	CHF ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
373	H	Cl	CH ₃	CF ₃	Cl	C ₂ H ₅	H	
374	F	F	CH ₃	CF ₃	H	H	H	151-152
375	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	176-178
376	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₃	測定不可
377	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₃	156-158
378	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ OH	
379	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
380	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₃	
381	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOCH ₃	
382	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH ₂ OH	
383	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	137-140
384	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	H	
385	Cl	H	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
386	F	H	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
387	F	CN	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
388	F	CH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	

(表 13)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
389	F	CF ₃	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
390	F	OCH ₃	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
391	F	OCHF ₂	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	
392	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Cl	H	181-182
393	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)Cl	H	1.5639
394	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)Br	H	1.5562
395	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	
396	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)Cl	H	
397	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CO- 	H	85-87
398	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₄ H ₉ -n	H	95-97
399	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₂ Cl	H	
400	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₂ Br	H	105-106
401	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₂ H ₅	H	測定不可
402	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₃ H ₇	H	66-67
403	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₃ H ₇ -i	H	
404	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C≡CH	H	143-144
405	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)CH=CH ₂	H	87-88
406	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₃ H ₇	H	1.5656
407	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₃ H ₇	H	156-157
408	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₃ H ₇ -i	H	
409	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₃ H ₇ -i	H	125-127
410	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₄ H ₉	H	1.5512
411	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₄ H ₉	H	103-104
412	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=CH ₂	H	108-109
413	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C≡CH	H	
414	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₂ CF ₃	H	
415	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	
416	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH ₂ CF ₃	
417	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CO- 	154-156
418	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CO- 	116-117
419	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COC ₃ H ₇	124-126
420	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COC ₃ H ₇ -i	1.5344
421	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COC ₄ H ₉	104-105

(表 14)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
422	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₂ Br	1.5650
423	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ Cl	177-179
424	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH(CH ₃)OH	1.5345
425	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(C ₃ H ₇)=NOCH ₃	1.5397
426	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	C(CH ₂ Cl)=NOH	107-109
427	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH ₃	57-60
428	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OC ₂ H ₅	
429	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OC ₃ H ₇	
430	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OC ₃ H ₇ -i	
431	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH(CH ₃)OCH ₃	
432	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOC ₂ H ₅	133-135
433	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOC ₃ H ₇	124-125
434	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COOC ₄ H ₉	
435	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COC ₃ H ₇	1.5420
436	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CO- 	128-129
437	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH(CH ₃)OH	
438	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	CH(CH ₃)OCH ₃	
439	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOH	147-148
440	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CONH ₂	187-188
441	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CONHCH ₃	198-200
442	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CON(CH ₃) ₂	1.5336
443	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOC ₃ H ₇ -i	1.5290
444	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COC ₂ H ₅	1.5441
445	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COC ₃ H ₇	1.5401
446	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COC ₃ H ₇ -i	測定不可
447	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₂ Cl	129-130
448	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₂ Br	110-111
449	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CH ₂ OH	1.5255
450	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	CHO	123-124
451	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	C(CH ₃)=NOC ₃ H ₇ -i	1.5304
452	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	C(CH ₃)=NOCH ₃	1.5332
453	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	CH ₃	117-118
454	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	CH ₃	119-120




(表 15)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
455	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇	CH ₃	1.5498
456	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)CH ₃	CH ₃	130-131
457	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₂ H ₅	CH ₃	141-142
458	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₃ H ₇	CH ₃	1.5392
459	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	C ₂ H ₅	170-171
460	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	C ₂ H ₅	測定不可
461	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC ₃ H ₇	C ₂ H ₅	116-117
462	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)CH ₃	C ₂ H ₅	122-123
463	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₂ H ₅	C ₂ H ₅	測定不可
464	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(OH)C ₃ H ₇	C ₂ H ₅	測定不可
465	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃ C(CH ₃)=NOCH ₃		114-116
466	H	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅ NHCOCH ₃		156-158
467	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₃	H	1.5394
468	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCH ₃	H	84-86
469	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₃	H	182-183
470	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₂ H ₅	H	1.5540
471	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₂ H ₅	H	53-54
472	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₂ H ₅	H	73-75
473	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₃ H ₇	H	1.5325
474	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₃ H ₇	H	1.5585
475	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₃ H ₇	H	67-68
476	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₃ H ₇ -i	H	1.5461
477	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₃ H ₇ -i	H	1.5470
478	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₃ H ₇ -i	H	159-161
479	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₄ H ₉	H	1.5435
480	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₄ H ₉	H	1.5472
481	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₄ H ₉	H	125-126
482	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₃	H	1.5540
483	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOCH ₃	H	83-85
484	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	83-86
485	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SC ₂ H ₅	H	1.5562
486	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOC ₂ H ₅	H	1.5231
487	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ C ₂ H ₅	H	178-179






(表 16)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
488	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SC ₃ H ₇	H	
489	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOC ₃ H ₇	H	
490	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ C ₃ H ₇	H	
491	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SC ₃ H ₇ -i	H	
492	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOC ₃ H ₇ -i	H	
493	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ C ₃ H ₇ -i	H	
494	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SCH ₃	H	
495	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SOCH ₃	H	
496	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SO ₂ CH ₃	H	
497	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SC ₂ H ₅	H	
498	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SOC ₂ H ₅	H	
499	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇)SO ₂ C ₂ H ₅	H	
500	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SCH ₃	H	
501	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SOCH ₃	H	1.5281
502	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SO ₂ CH ₃	H	149-150
503	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SC ₂ H ₅	H	
504	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SOC ₂ H ₅	H	1.5404
505	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₃ H ₇ -i)SO ₂ C ₂ H ₅	H	1.5390
506	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ SCH ₃	H	
507	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ SOCH ₃	H	
508	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ SO ₂ CH ₃	H	227-230
509	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(C ₂ H ₅)SOCH ₃	H	
510	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	85-87
511	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(C ₃ H ₇)SO ₂ CH ₃	H	92-93
512	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(CH ₂ OCH ₃)SOCH ₃	H	
513	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(CH ₂ OCH ₃)SO ₂ CH ₃	H	1.5365
514	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)(CH ₂ SCH ₃)SO ₂ CH ₃	H	
515	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCF ₃	H	測定不可
516	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCF ₃	H	
517	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CF ₃	H	
518	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCHF ₂	H	
519	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCHF ₂	H	
520	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CHF ₂	H	



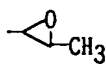

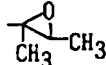
(表 17)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
521	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SCH ₂ COOCH ₃	H	1.5390
522	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SOCH ₂ COOCH ₃	H	
523	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₂ COOCH ₃	H	
524	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₂ COOCH ₃	H	1.5411
525	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₃ H ₆ Cl	H	
526	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₃ H ₆ Cl	H	
527	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₂ H ₄ COOCH ₃	H	
528	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₂ H ₄ COOCH ₃	H	
529	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₂ CONHCH ₃	H	
530	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₂ CONHCH ₃	H	
531	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₂ CON(CH ₃) ₂	H	
532	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₂ CON(CH ₃) ₂	H	
533	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₂ COOH	H	
534	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCH ₂ COOH	H	
535	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₂ COOH	H	
536	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)S 	H	
537	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO 	H	
538	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ 	H	
539	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SOCH ₃	H	127-129
540	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SH	H	
541	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCOCH ₃	H	
542	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCON(CH ₃) ₂	H	
543	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCONHCH ₃	H	
544	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCSN(CH ₃) ₂	H	
545	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCSNHCH ₃	H	
546	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)Br	H	1.5389
547	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCF ₃	H	1.5140
548	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCN	H	1.5450
549	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ OH	H	160-161
550	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CF ₃	H	
551	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHSO ₂ CF ₃	H	測定不可
552	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ Cl)SCH ₃	H	
553	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ Cl)SOCH ₃	H	



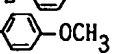



(表 18)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
554	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ Cl)SO ₂ CH ₃	H	
555	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SCH ₃	H	
556	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SOCH ₃	H	
557	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SO ₂ CH ₃	H	
558	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SCH ₃	H	
559	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SOCH ₃	H	
560	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SO ₂ CH ₃	H	
561	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH()SCH ₃	H	
562	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH()SOCH ₃	H	
563	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH()SO ₂ CH ₃	H	
564	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	 SO ₂ CH ₃	H	
565	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ OCH ₃)SCH ₃	H	測定不可 1.5341
566	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ OCH ₃)SO ₂ CH ₃	H	
567	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ SCH ₃)SCH ₃	H	
568	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CF ₃)SCH ₃	H	
569	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CF ₃)SOCH ₃	H	
570	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CF ₃)SO ₂ CH ₃	H	
571	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHCH ₃	H	
572	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)N(CH ₃) ₂	H	
573	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHSO ₂ CF ₃	H	
574	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHSO ₂ CH ₃	H	
575	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHCOCH ₃	H	
576	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NHCOCH ₂ Cl	H	
577	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCN	H	60-63
578	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH()OH	H	113-115
579	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ Cl)OH	H	120-121 1.5080
580	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ Br)OH	H	
581	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CF ₃)OH	H	
582	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ OCH ₃)OH	H	
583	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₂ SCH ₃)OH	H	
584	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	
585	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OC ₂ H ₅	H	

(表 19)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
586	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OC ₃ H ₇	H	1. 5241
587	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCHF ₂	H	
588	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ - 	H	
589	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ COOCH ₃	H	
590	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ CON(CH ₃) ₂	H	
591	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCOCH ₃	H	1. 5251
592	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCON(CH ₃) ₂	H	1. 5937
593	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCSN(CH ₃) ₂	H	1. 5389
594	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCONHCH ₃	H	
595	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCSNHCH ₃	H	
596	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)NH ₂	H	
597	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)CN	H	
598	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)CONH ₂	H	
599	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ OCH ₃	H	
600	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ SCH ₃	H	
601	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH=CH ₂	H	1. 5397
602	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COC≡CH	H	
603	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₂ OCH ₃	H	
604	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₂ SCH ₃	H	
605	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₅ H ₁₁	H	
606	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	109-111
607	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	1. 5389
608	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	
609	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H		H	
610	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=CHCH ₃	H	149-151
611	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=CH ₂	H	155-156
612	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=CHCH ₃	H	153-155
613	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(C ₂ H ₅)=CH ₂	H	153-155
614	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(C ₂ H ₅)=CHCH ₃	H	

(表 20)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) ₂₀ 屈折率 n _D
615	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃)=C(CH ₃) ₂	H	
616	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH=C(CH ₃) ₂	H	
617	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ Br	181-183
618	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ CN	224-226
619	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH ₂ CONH ₂	127-129
620	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCHF ₂	
621	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH ₂ CH=CH ₂	
622	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH ₂ C≡CH	1.5331
623	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH ₂ COOCH ₃	53-55
624	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	OCH(CH ₃)COOCH ₃	71-73
625	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCHF ₂	
626	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH ₂ CH=CH ₂	
627	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH ₂ C≡CH	
628	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH ₂ COOC ₂ H ₅	
629	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	SCH(CH ₃)COOCH ₃	
630	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CO- 	1.5275
631	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CSCH ₃	1.5967
632	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₂ - 	1.5331
633	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₂ - 	
634	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COOCH ₂ CH ₂ F	109-110
635	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=CH ₂	58-60
636	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	CH=CHCH ₃	1.5409
637	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃		
638	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃		169-170
639	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₂ Br	158-159
640	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOC ₂ H ₅	1.5140
641	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOC ₅ H ₁₁	1.5209
642	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COOCH ₂ - 	1.5485
643	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	CHO	128-130
644	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	COOCH ₃	1.5410
645	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉	COOH	1.5342

(表 2 1)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
646	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉ -i	CHO	54-55
647	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉ -i	COOCH ₃	62-63
648	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₄ H ₉ -i	COOH	208-209
649	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₅ H ₁₁	CHO	測定不可
650	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₅ H ₁₁	COOCH ₃	1.5271
651	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₅ H ₁₁	COOH	1.5156
652	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	CH ₂ Br	225-227
653	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	CHBr ₂	146-147
654	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	NO ₂	CH ₃	146-148
655	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	H	COOCH ₃	95-97
656	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	COOCH ₃	91-93
657	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	COOCH ₃	95-97
658	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)OH	COOCH ₃	142-145
659	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Br	COOC ₂ H ₅	1.5535
660	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SCH ₃	COOC ₂ H ₅	103-105
661	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₃	COOC ₂ H ₅	73-75
662	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ SO ₂ CH ₃	COOC ₂ H ₅	182-183
663	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SC ₂ H ₅	COOC ₂ H ₅	1.5481
664	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ C ₂ H ₅	COOC ₂ H ₅	57-59
665	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHBr ₂	COOC ₂ H ₅	112-114
666	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CHO	COOC ₂ H ₅	測定不可
667	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	COOC ₂ H ₅	1.5378
668	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	COOC ₂ H ₅	1.5466
669	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)Br	COOC ₂ H ₅	1.5300
670	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)Cl	COOC ₂ H ₅	測定不可
671	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)CN	COOC ₂ H ₅	1.5348
672	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	H	COOC ₂ H ₅	1.5468
673	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ Cl	CH ₂ Cl	202-203
674	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SCH ₃	CH ₂ SCH ₃	115-116
675	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₂ SO ₂ CH ₃	CH ₂ SO ₂ CH ₃	169-171
676	F	F	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	H	204-205
677	F	F	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	H	136-137
678	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	1.5220

(表 2 2)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n_D^{20}
679	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OC ₂ H ₅	H	
680	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)OH	H	137-138
681	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)OH	H	1.5090
682	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₃	H	1.5415
683	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCH ₃	H	
684	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₃	H	79-80
685	F	F	CH ₃	CF ₃	H	C(CH ₃) ₂ SO ₂ CH ₃	H	108-111
686	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₂ H ₅	H	1.5345
687	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₂ H ₅	H	
688	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₂ H ₅	H	72-73
689	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₃	H	
690	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOCH ₃	H	1.5251
691	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	1.5170
692	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SC ₂ H ₅	H	1.5339
693	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOC ₂ H ₅	H	1.5325
694	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ C ₂ H ₅	H	1.5250
695	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)CN	H	
696	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)CONH ₂	H	
697	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SH	H	
698	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	136-137
699	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	148-149
700	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	114-115
701	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇ -i	H	1.5435
702	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₃	1.5542
703	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₃	1.5495
704	Cl	Cl	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₃	1.5487
705	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	H	H	137-138
706	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	H	182-184
707	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	145-147
708	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	1.5552
709	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	COCH ₃	H	187-189
710	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	COC ₂ H ₅	H	124-125
711	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	H	144-146

(表 2 3)

化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
712	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)OH	H	1.5420
713	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	1.5322
714	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OC ₂ H ₅	H	
715	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₃	H	
716	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCH ₃	H	88-90
717	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₃	H	107-109
718	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SC ₂ H ₅	H	
719	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOC ₂ H ₅	H	1.5561
720	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ C ₂ H ₅	H	1.5382
721	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₃	H	
722	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOCH ₃	H	
723	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	
724	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	COCH ₃	1.5500
725	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	COCH ₃	1.5460
726	F	Br	CH ₃	CF ₃	H	C ₃ H ₇	COCH ₃	1.5408
727	F	H	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	129-130
728	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	H	H	
729	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH ₃	H	
730	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	145-147
731	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	
732	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	H	
733	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₃	H	
734	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₃	H	
735	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₃	H	
736	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	
737	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	
738	F	Cl	NH ₂	CF ₃	H	COCH ₃	H	
739	F	F	NH ₂	CF ₃	H	H	H	
740	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH ₃	H	
741	F	F	NH ₂	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	
742	F	F	NH ₂	CF ₃	H	C ₃ H ₇	H	
743	F	F	NH ₂	CF ₃	H	COCH ₃	H	
744	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)OH	H	

(表 2 4)

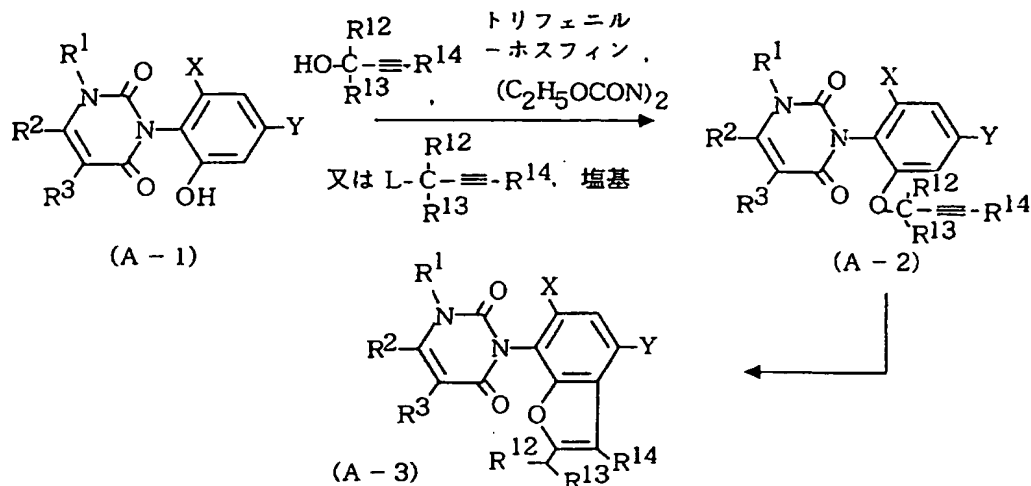
化合物 番号	X	Y	R ¹	R ²	R ³	R ⁴	R ⁵	融点(°C) 屈折率 n _D ²⁰
745	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₃	H	
746	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₃	H	
747	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₃	H	
748	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₃	H	
749	F	F	NH ₂	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₃	H	
750	Cl	F	CH ₃	CF ₃	H	C ₂ H ₅	H	測定不可
751	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH ₃	NHOH	107-109
752	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCH ₂ CF ₃	H	1.5351
753	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SOCH ₂ CF ₃	H	73-75
754	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SO ₂ CH ₂ CF ₃	H	128-129
755	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SCH ₂ CF ₃	H	
756	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SOCH ₂ CF ₃	H	
757	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)SO ₂ CH ₂ CF ₃	H	測定不可
758	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SCH ₂ CF ₃	H	
759	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SOCH ₂ CF ₃	H	
760	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)SO ₂ CH ₂ CF ₃	H	
761	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SCH ₂ CF ₃	H	
762	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SOCH ₂ CF ₃	H	
763	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)SO ₂ CH ₂ CF ₃	H	
764	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)OCH ₃	H	1.5158
765	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ CF ₃	H	1.5165
766	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)OCH ₂ CH ₂ F	H	1.5312
767	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH=CH ₂)OCH ₂ CF ₃	H	
768	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C≡CH)OCH ₂ CF ₃	H	
769	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)OCH ₂ CF ₃	H	
770	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CH(CH ₃)SCSN(C ₂ H ₅) ₂	H	1.5537
771	F	F	CH ₃	CF ₃	H	CH(C ₂ H ₅)OCH ₃	H	1.5216
772	F	Cl	CH ₃	CF ₃	H	CB ₂ C ₂ H ₅	H	197-199

次に本発明化合物の一般的製造法について説明する。

製造法 1

一般式〔1〕で示される化合物中、R⁴がアルキル基、シクロアルキル基又は

置換されていてもよいベンジル基であり、R⁵が水素原子、アルキル基、置換されていてもよいベンジル基又は置換されていてもよいフェニル基である本発明化合物は以下のようにして製造することができる。



(式中、R¹、R²、R³、X及びYはそれぞれ前記と同じ意味を表し、Lは脱離基を表し、R¹²及びR¹³はそれぞれ水素原子、アルキル基又は置換されていてもよいフェニル基を表すか、あるいはR¹²とR¹³は互いに連なる炭素環を表し、R¹⁴は水素原子、アルキル基、置換されていてもよいベンジル基又は置換されていてもよいフェニル基を表す。)

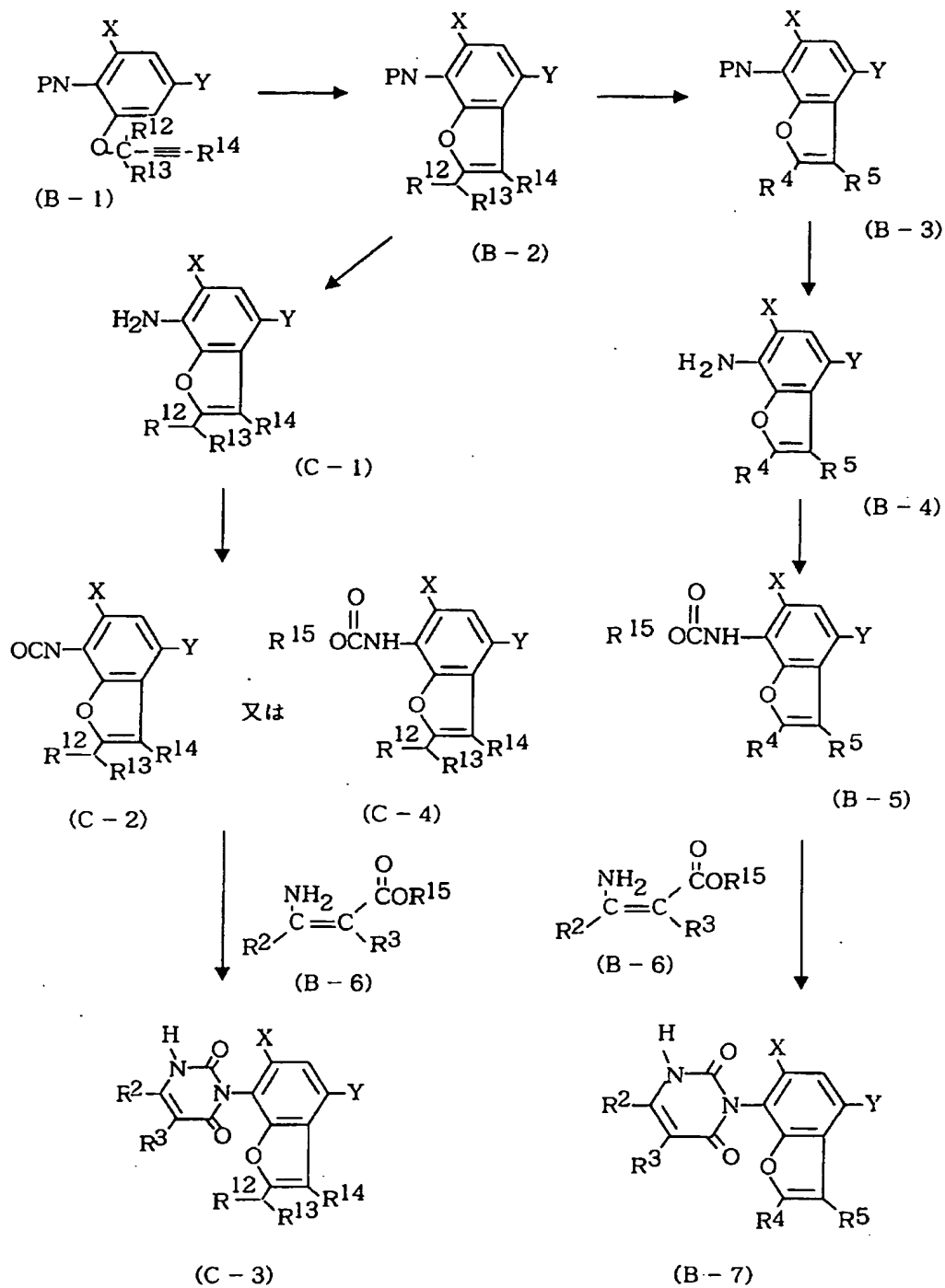
化合物(A-1)とプロパルギルアルコール誘導体とをアゾ化合物及びトリフェニルホスフィンの存在下で反応させる公知の方法(シンセシス Synthesis, 1981, 1-28)によるか、又は脱離基を含んだプロパルギル誘導体とを塩基存在下で縮合させる通常の方法により化合物(A-2)を得ることができる。さらに、化合物(A-2)を溶媒中、塩基存在下で環化させることにより化合物(A-3)を製造することができる。

ここで、溶媒としてはトルエン、キシレン、メシチレン等の芳香族炭化水素類、1,4-ジオキサン、テトラヒドロフラン等のエーテル類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物、キノリン、ピリジン等の芳香族含窒素化合物、N,N-ジエチルアニリン、N,N-ジメチルアニリン等のアニリン誘導体が挙げられる。特に、化合物(A

ー 2) の閉環反応については N, N-ジエチルアニリンが好ましい。さらに、アゾ化合物としてはアゾカルボン酸ジエチルが好ましい。塩基としてはアルカリ金属又はアルカリ土類金属等の水素化物、水酸化物、炭酸化合物、炭酸水素化合物もしくは有機酸塩、フッ化セシウム、フッ化カリウム等のフッ化金属化合物あるいはトリエチルアミン、1, 8-ジアザビシクロ [5. 4. 0] -7-ウンデセン、ピリジン等の有機塩基が挙げられる。反応温度は氷温から溶媒の還流温度までで実施できる。

製造法 2

一般式 [1] で示される化合物中、R¹ が水素原子である本発明化合物 (B-7) 及び本発明化合物 (C-3) は以下のようにして製造することができる。



(式中、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 X 及び Y はそれぞれ前記と同じ意味を表し、 R^{15} はアルキル基、置換されていてもよいフェニル

基又は置換されていてもよいベンジル基を表し、PNはモノもしくはジアシルアミノ基、モノもしくはジハロアルキルカルボニルアミノ基、モノもしくはジアルキルスルホニルアミノ基、モノもしくはジハロアルキルスルホニルアミノ基、テトラヒドロフタルイミノ基又はフタルイミノ基等の保護基を持つアミノ基を表す。)

製造法1に述べた方法と同様にして化合物(B-1)を閉環し、化合物(B-2)を製造することができる。次に、化合物(B-2)を、以後に述べるウラシル誘導体の製造法(製造法5～製造法35)又は叢書(メソーデン・デル・オルガニッシェン・ケミエ、第E6b1巻、第33頁～第162頁、1994年)に記載された方法等に準じて化合物(B-3)に変換し、この保護基を取り除きアニリン化合物(B-4)を製造することができる。アニリン化合物(B-4)を通常の方法によりクロロ炭酸フェニル等と反応させることにより、カーバメート化合物(B-5)とした後、化合物(B-6)と反応させて得られる生成物を酸処理することにより目的の化合物(B-7)を製造することができる。

あるいは、化合物(B-2)の保護基を取り除きアニリン化合物(C-1)を製造することができる。アニリン化合物(C-1)にホスゲン等を反応させて化合物(C-2)とするか、又はクロロ炭酸フェニル等を反応させて化合物(C-4)とした後、これらの化合物をそれぞれ化合物(B-6)と反応させて得られる生成物を酸処理することにより目的の化合物(C-3)を製造することができる。

保護基Pを取り除く方法は、塩基存在下での加水分解によるか、あるいは保護基がテトラヒドロフタルイミノ基又はフタルイミノ基等の場合にはヒドラジンと反応させることによっても取り除くことができる。

化合物(B-5)又は化合物(C-4)の製造は通常、溶媒中で塩基の存在下、反応温度0～120℃、好ましくは20～80℃で0.5～24時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物(B-4)又は化合物(C-1)1当量に対してクロロ炭酸誘導体は1～2当量、塩基は1～1.5当量である。塩基としては、炭酸カリウム、水素化ナトリウム等の無機塩基、トリエチルアミン、1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン、ピリジン等の有機塩

基が挙げられる。溶媒としてはジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、クロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類又はそれらの混合物が挙げられる。

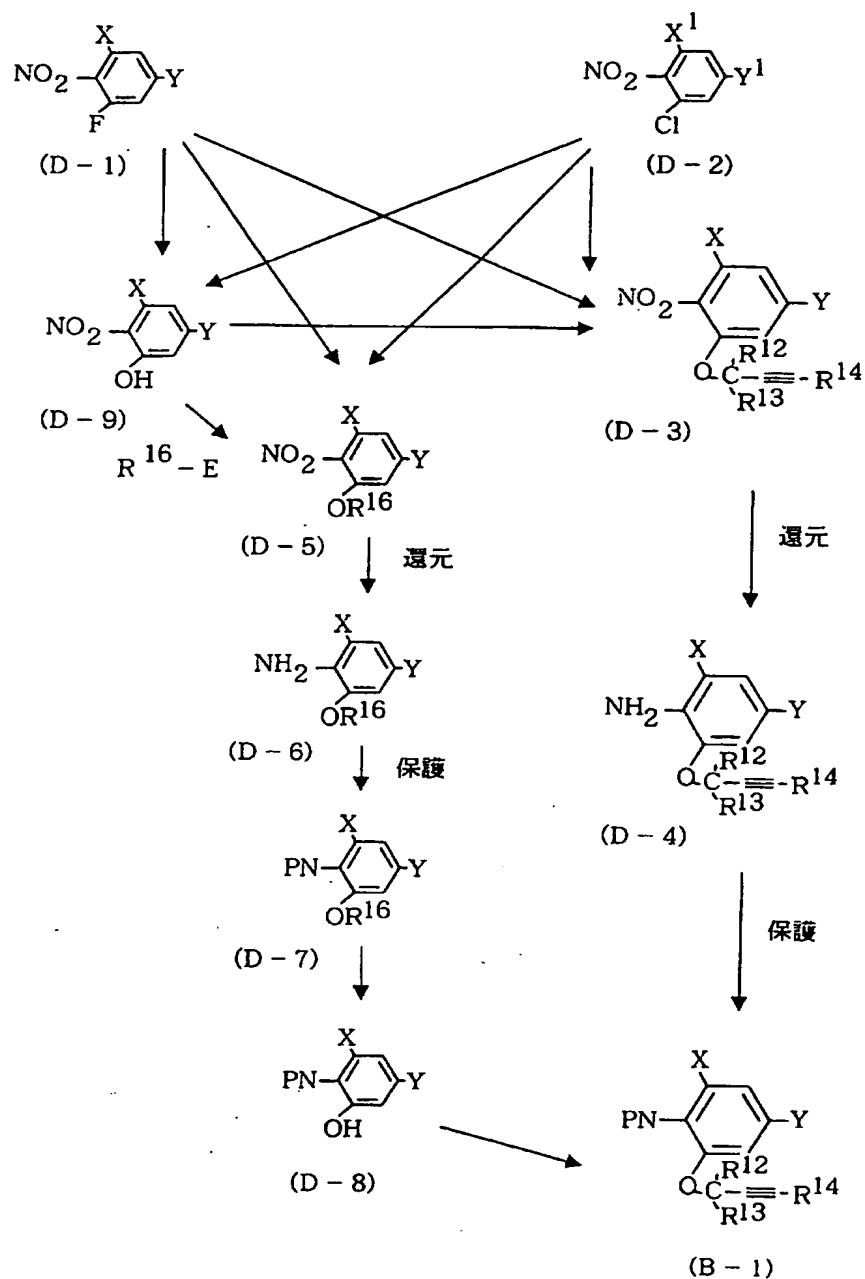
化合物(C-2)の製造は通常、溶媒中、反応温度0~120℃、好ましくは20~100℃で0.5~24時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物(C-1)1当量に対してホスゲンは2~10当量、塩基は1~1.5当量である。溶媒としてはクロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素類又はそれらの混合物が挙げられる。

化合物(B-5)から化合物(B-7)の製造又は化合物(C-4)から化合物(C-3)の製造は通常、溶媒中で塩基の存在下、反応温度0~150℃、好ましくは20~120℃で0.5~24時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物(B-5)又は化合物(C-4)1当量に対して化合物(B-6)1~10当量、塩基は1~10当量である。塩基としては、水素化カリウム、水素化ナトリウム等の無機塩基、1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン等の有機塩基が挙げられる。溶媒としてはジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素類、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物又はそれらの混合物が挙げられる。

化合物(C-2)から化合物(C-3)の製造は通常、溶媒中で塩基の存在下、反応温度0~60℃、好ましくは5~30℃で0.5~24時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物(C-2)1当量に対して化合物(B-6)1~1.5当量、塩基は1~1.5当量である。塩基としては、水素化カリウム、水素化ナトリウム等の無機塩基等が挙げられる。溶媒としてはジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素類、N, N-ジメチルホル

ムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物又はそれらの混合物が挙げられる。

原料化合物 (B-1) は以下のようにして製造することができる。



(式中、R¹²、R¹³、R¹⁴、PN、X及びYはそれぞれ前記と同じ意味を

表し、 R^{16} はアルキル基又は置換されていてもよいベンジル基を表し、 X^1 及び Y^1 はそれぞれフッ素原子以外のX及びYを表し、Eは塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子又はメタンスルホニルオキシ基を表す。)

化合物(D-1)又は化合物(D-2)を対応するアルキニルアルコールと塩基存在下で反応させることにより化合物(D-3)を製造することができる。あるいは、化合物(D-1)又は化合物(D-2)を塩基存在下で加水分解することにより化合物(D-9)を製造した後、製造法1に述べた方法に準じて化合物(D-3)を製造することができる。次に、得られた化合物(D-3)を還元することにより化合物(D-4)を製造した後、窒素原子を保護基で保護することにより化合物(B-1)を製造することができる。

また、化合物(D-1)又は化合物(D-2)を対応するアルコールと塩基存在下で反応させるか、あるいは化合物(D-9)を化合物 $R^{16}-E$ と反応させることにより化合物(D-5)を製造することができる。次に、化合物(D-5)を還元することにより化合物(D-6)を製造した後、窒素原子を保護基で保護することにより化合物(D-7)を製造することができる。さらに、化合物(D-7)から R^{16} を取り除き、化合物(D-8)を製造した後、製造法1に述べた方法に準じて化合物(B-1)を製造することができる。

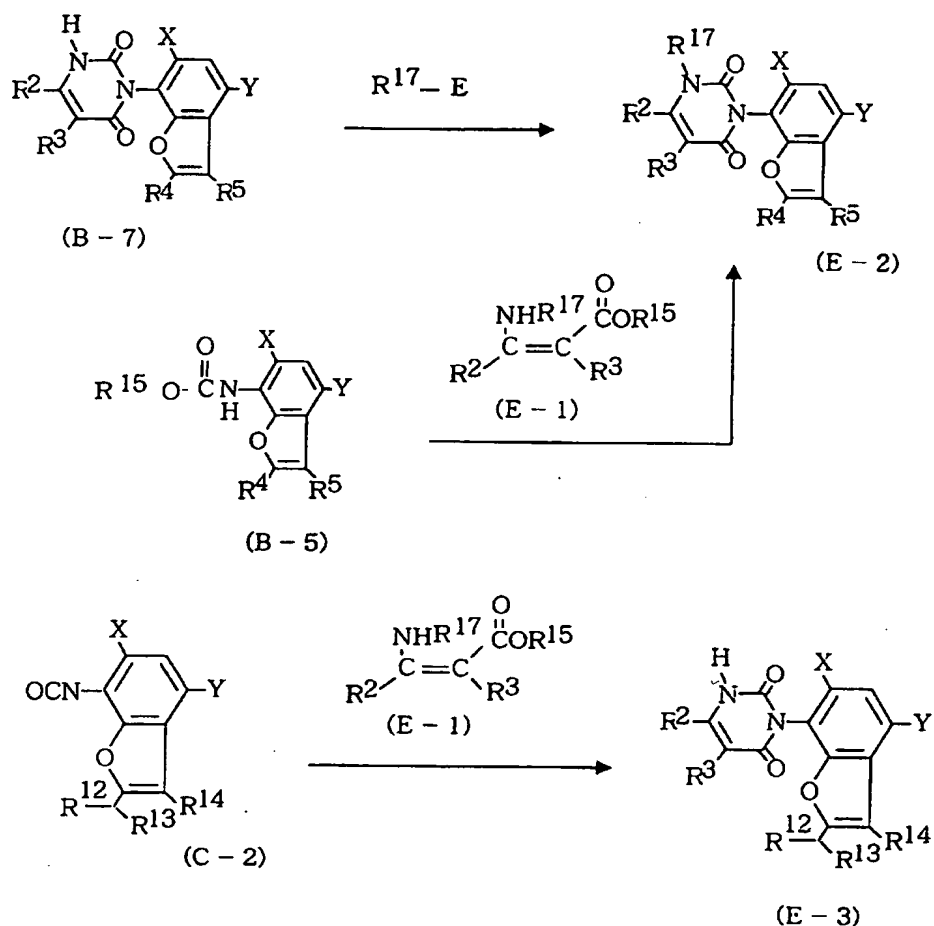
R^{16} を取り除く方法は、 R^{16} がアルキル基の場合は三臭化ホウ素等の脱アルキル化剤を用い、 R^{16} が置換されてもよいベンジル基の場合は常圧下で水素添加することにより取り除くことができる。

なお、例えばXがフッ素原子でYが塩素原子又は臭素原子である化合物〔(D-1)に相当〕は、例えば2, 6-ジフルオロアニリンをN-クロロコハク酸イミド(NCS)又はN-ブロモコハク酸イミド(NBS)等のハロゲン化剤によりフェニル環の4位を塩素化又は臭素化した後、例えばメタクロロ過安息香酸等の酸化剤で酸化することにより製造することができる。

例えばXがフッ素原子でYがシアノ基である化合物〔(D-1)に相当〕は、2, 6-ジフルオロ-4-シアノアニリンを例えばメタクロロ過安息香酸等の酸化剤で酸化することにより製造することができる。

製造法 3

一般式〔1〕で示される化合物の中、 R^1 がアルキル基又はハロアルキル基である本発明化合物(E-2)又は本発明化合物(E-3)は以下のようにして製造することができる。



(式中、 R^2 、 R^3 、 R^4 、 R^5 、 R^{12} 、 R^{13} 、 R^{14} 、 R^{15} 、 E 、 X 及び Y はそれぞれ前記と同じ意味を表し、 R^{17} はアルキル基又はハロアルキル基を表す。)

前記製造法1で製造される化合物(A-3)中、 R^1 が水素原子である本発明化合物(B-7)又は前記製造法2で製造される本発明化合物(B-7)を化合物 $R^{17}-E$ と反応させるか、あるいは化合物(B-5)と化合物(E-1)と

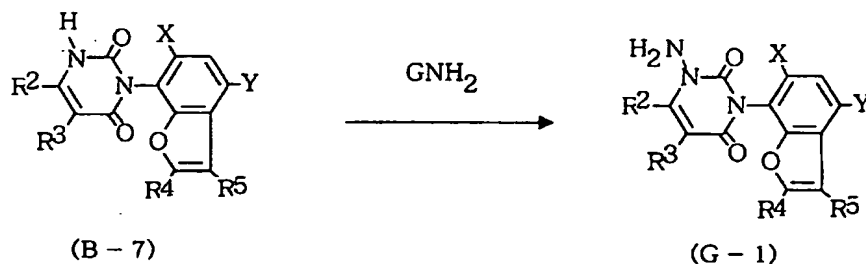
を製造法 2 に示した方法に準じて反応させることによって化合物 (E-2) を製造することができる。

また、化合物 (C-2) と化合物 (E-1) とを製造法 2 に示した方法に準じて反応させることによって化合物 (E-3) を製造することができる。

化合物 (B-7) から化合物 (E-2) の製造は通常、溶媒中で塩基の存在下、反応温度 0 ~ 100℃ で 0.5 ~ 24 時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物 (B-7) 1 当量に対して化合物 R¹⁷-E は 1 ~ 10 当量、塩基は 1 ~ 1.5 当量である。塩基としては、炭酸カリウム、水素化カリウム、水素化ナトリウム等の無機塩基、ナトリウムエトキシド、ナトリウムメトキシド等のアルカリ金属アルコキシド等が挙げられる。溶媒としてはクロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素類、アセトン、メチルイソブチルケトン等のケトン類、酢酸エチル等のエステル類、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物又はそれらの混合物が挙げられる。

製造法 4

一般式 [1] で示される化合物の中、R¹ がアミノ基である本発明化合物 (G-1) は以下のようにして製造することができる。



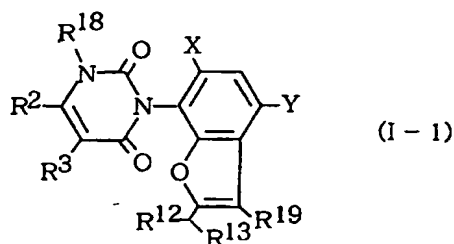
(式中、R²、R³、R⁴、R⁵、X及びYはそれぞれ前記と同じ意味を表し、Gはメタンスルホニルオキシ基、パラトルエンスルホニルオキシ基又は2, 4-ジニトロフェノキシ基を表す。)

前記製造法 1 で製造される化合物 (A-3) 中、 R^1 が水素原子である本発明化合物 (B-7) 又は前記製造法 2 で製造される本発明化合物 (B-7) を化合物 $G-NH_2$ と反応させることによって化合物 (G-1) を製造することができる。

この反応は通常、溶媒中で塩基の存在下、反応温度 $0 \sim 100^\circ C$ で $0.5 \sim 24$ 時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物 (B-7) 1 当量に対して化合物 $G-NH_2$ は $1 \sim 10$ 当量、塩基は $1 \sim 1.5$ 当量である。塩基としては、炭酸カリウム、水素化カリウム、水素化ナトリウム等の無機塩基、ナトリウムエトキシド、ナトリウムメトキシド等のアルカリ金属アルコキシド等が挙げられる。溶媒としてはクロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、ジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類、ヘキサン、ヘプタン等の脂肪族炭化水素類、アセトン、メチルイソブチルケトン等のケトン類、酢酸エチル等のエステル類、N, N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物又はそれらの混合物が挙げられる。

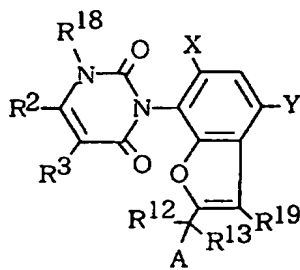
製造法 5

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 がハロアルキル基である本発明化合物は、一般式

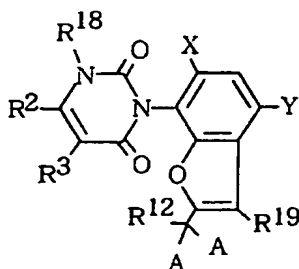


(式中、 R^2 、 R^3 、 R^{12} 、 R^{13} 、 X 及び Y はそれぞれ前記と同じ意味を表し、 R^{18} はアミノ基、アルキル基又はハロアルキル基を表し、 R^{19} は水素原子、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、ハロゲン原子、置換されていてもよいフェニル基、ニトロ基、アルコキシ

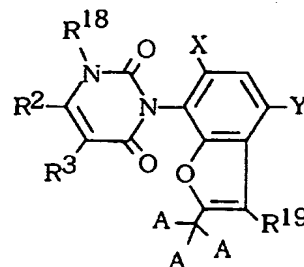
カルボニル基又は置換されていてもよいベンジル基を表す。)で表される化合物 (I-1) とハロゲン化剤とを反応させることにより、一般式



(I-2)



(I-3)



(I-4)

(式中、R¹、R²、R³、R¹²、R¹³、R¹⁸、R¹⁹、X及びYはそれぞれ前記と同じ意味を表し、Aはハロゲン原子を表す。)で示される化合物の混合物として製造することができる。〔但し、化合物(I-3)は化合物(I-1)のR¹³が水素原子である場合のみ製造することができ、また、化合物(I-4)は化合物(I-1)のR¹²及びR¹³が共に水素原子である場合のみ製造することができる。〕これらの化合物の混合物を単離精製することにより目的化合物を得ることができる。

本反応は溶媒中、触媒の存在下又は非存在下で、反応温度0～150℃、好ましくは30～100℃で0.5～24時間反応させる。反応に供される試剤の量は化合物(I-1)1当量に対してハロゲン化剤は1～10当量であり、触媒は0.01～0.5当量である。ハロゲン化剤としては臭素、塩素等のハロゲン、N-ブロモコハク酸イミド等のN-ハロコハク酸イミド、過臭化ピリジニウム等のピリジン塩等が挙げられる。溶媒としてはクロロホルム、四塩化炭素等のハロゲン化炭化水素類、ギ酸、酢酸等のカルボン酸類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物等が挙げられる。触媒としては過酸化ベンゾイル、 α , α' -アゾビスイソブチロニトリル又はそれらの混合物が挙げられる。

製造法6

一般式[1]で示される化合物中、R⁴がホルミル基である本発明化合物は、

前記製造法5で製造される化合物(I-3)で R^{12} が水素原子である化合物を常法により加水分解することにより製造することができる。

製造法7

一般式[1]で示される化合物中、 R^4 がカルボキシル基である本発明化合物は、前記製造法5で製造される化合物(I-4)を加水分解するか、又は前記製造法6で製造される R^4 がホルミル基である本発明化合物を、例えばジョーンズ試薬(三酸化クロム、硫酸及び水の混合溶液; オルガニック・シンセセス Organic Syntheses col. vol. 1参照)等の酸化剤で酸化することにより製造することができる。

製造法8

一般式[I]で示される化合物中、 R^4 が水素原子である本発明化合物は、前記製造法7で製造される R^4 がカルボキシル基である本発明化合物を銅触媒存在下で脱炭酸することにより製造することができる。

製造法9

一般式[1]で示される化合物中、 R^4 が基-COR²⁰である本発明化合物は、前記製造法8で製造される R^4 が水素原子である化合物と対応する酸無水物($R^{20}CO$)₂O又は酸ハライド $R^{20}COL^1$ とをルイス酸存在下でフリーデルクラフツ反応させることによって製造することができる。(式中、 R^{20} はアルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基又は置換されていてもよいフェニル基を表し、 L^1 は塩素原子、臭素原子又はヨウ素原子を表す。)

また、 R^4 が基-COR¹²である本発明化合物は、前記製造法5で製造される化合物(I-3)で R^{12} がアルキル基又は置換されていてもよいフェニル基である化合物を製造法6と同様に加水分解することによって製造することができる。

製造法10

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 がヒドロキシイミノアルキル基、ヒドロキシイミノハロアルキル基、アルコキシイミノアルキル基又はアルコキシイミノハロアルキル基である本発明化合物は、前記製造法6もしくは製造法9で製造される R^4 がアシル基又はハロアルキルカルボニル基である本発明化合物と一般式 NH_2OR^{21} （式中、 R^{21} は水素原子又はアルキル基を表す。）で示される化合物又はその硫酸塩もしくは塩酸塩とを反応させることにより製造することができる。

製造法11

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 がヒドラゾノアルキル基、アルキルヒドラゾノアルキル基、置換されていてもよいフェニルヒドラゾノアルキル基、アルキルイミノアルキル基又は置換されていてもよいフェニルイミノアルキル基である本発明化合物は、前記製造法6もしくは製造法9で製造される R^4 がアシル基である本発明化合物と一般式 $NH_2NR^{22}(R^{23})$ （式中、 R^{22} 及び R^{23} はそれぞれ互いに同一又は相異なり水素原子、アルキル基もしくは置換されていてもよいフェニル基を表す。）で示される化合物又はその硫酸塩もしくは塩酸塩とを反応させることにより製造することができる。

製造法12

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 がシアノ基である本発明化合物は、前記製造法10で製造される R^4 がヒドロキシイミノメチル基である本発明化合物を、例えばパラトルエンスルホン酸等の酸触媒存在下で脱水することにより製造することができる。

製造法13

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)OH$ である本発明化合物は、前記製造法6又は前記製造法9で製造される R^4 が基 $-COR^6$ である本発明化合物とグリニャール試薬 R^7MgL^1 とを反応させることにより製造することができる。（式中、 R^6 、 R^7 及び L^1 は前記と同じ意味

を表す。)

製造法 14

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-COR^7$ である本発明化合物は、前記製造法 13 で製造される R^4 が基 $-CH(R^7)OH$ である本発明化合物をジョーンズ試薬等で酸化することにより製造することができる。(式中、 R^7 は前記と同じ意味を表す。)

製造法 15

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-CH(R^7)OH$ である本発明化合物は、前記製造法 6、前記製造法 9 又は前記製造法 14 で製造される R^4 が基 $-COR^7$ である本発明化合物を、例えばジイソブチルアルミニウムハイドライド等の還元剤を用いて還元することにより製造することができる。(式中、 R^7 は前記と同じ意味を表す。)

製造法 16

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)L^1$ である本発明化合物は、前記製造法 13 で製造される R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)OH$ である本発明化合物を、例えば〔トリフェニルホスフィン/クロラニル(テトラクロロベンゾキノン)〕等のハロゲン化剤を用いてハロゲン化することにより製造することができる。(式中、 R^6 、 R^7 及び L^1 は前記と同じ意味を表す。)

製造法 17

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)ZR^9$ 又は基 $-C(R^6)(R^7)N(R^6)R^{24}$ である本発明化合物は、前記製造法 5 で製造される化合物 (1-2) 又は前記製造法 16 で製造される化合物と一般式 R^9SH 、一般式 R^9OH 又は一般式 $R^6(R^{24})NH$ (式中、 R^6 、 R^7 、 R^9 及び Z はそれぞれ前記と同じ意味を表し、 R^{24} は水素原子又はアルキル基

を表す。)で示される化合物とを反応させることにより製造することができる。本反応は溶媒中で塩基の存在又は非存在下、反応温度0～100℃、好ましくは20～80℃で0.5～24時間反応させる。本反応に用いられる溶媒としてはジエチルエーテル、テトラヒドロフラン等のエーテル類、N,N-ジメチルホルムアミド等のアミド類、ジメチルスルホキシド、スルホラン等の硫黄化合物、ベンゼン、トルエン等の芳香族炭化水素類が挙げられ、塩基としては水素化ナトリウム、水素化カリウム等の金属水素化物、炭酸カリウム、ナトリウムメトキシド等が挙げられる。

製造法18

一般式〔1〕で示される化合物中、R⁴が基-C(R⁶)(R⁷)WR⁹である本発明化合物は、前記製造法16で製造されるR⁴が基-C(R⁶)(R⁷)SR⁹で示される化合物をメタクロ過安息香酸又は過酸化モノ硫酸カリウム(商品名オキシソ)等の酸化剤で酸化することによって製造することができる。(式中、R⁶、R⁷、R⁹及びWはそれぞれ前記と同じ意味を表す。)

製造法19

一般式〔1〕で示される化合物中、R⁴が基-COOR²⁵である本発明化合物は、前記製造法7で製造されるR⁴がカルボキシ基である化合物と一般式R²⁵OHで示される化合物とを酸触媒存在下で反応させるか、あるいは一般式R²⁶-L¹で示される化合物とを塩基存在下で反応させることにより製造することができる。(式中、L¹は前記と同じ意味を表し、R²⁵はアルキル基、ハロアルキル基、置換されていてもよいベンジル基又は置換されていてもよいフェニル基を表し、R²⁶はアルキル基、ハロアルキル基又は置換されていてもよいベンジル基を表す。)

製造法20

一般式〔1〕で示される化合物中、R⁴が(窒素原子に、同一又は相異なる水素原子、アルキル基、もしくは置換されていてもよいフェニル基が置換した)カ

ルバモイル基である本発明化合物は、前記製造法 7 で製造される R^4 がカルボキシル基である本発明化合物と塩化チオニルとを反応させた後、次に、一般式 $R^{27} (R^{28}) NH$ (式中、 R^{27} 及び R^{28} はそれぞれ互いに同一又は相異なり水素原子、アルキル基もしくは置換されてもよいフェニル基を表す。) で示される化合物とを反応させることにより製造することができる。

製造法 2 1

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-C (R^6) (R^7) SH$ である本発明化合物は、前記製造法 5 で製造される化合物 (I-2) 又は前記製造法 1 6 で製造される化合物のうち、 R^4 が基 $-C (R^6) (R^7) L^1$ である本発明化合物を塩基存在下で、硫化ナトリウム又は水硫化ナトリウム等のチオール化剤と反応させた後、酸処理することにより製造することができる。(式中、 R^6 、 R^7 及び L^1 は前記と同じ意味を表す。)

製造法 2 2

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-C (R^6) (R^7) Z R^8$ である本発明化合物は、前記製造法 1 5 で製造される R^4 が基 $-CH (R^7) OH$ である本発明化合物、前記製造法 1 3 で製造される R^4 が基 $-C (R^6) (R^7) OH$ である本発明化合物又は前記製造法 2 1 で製造される R^4 が基 $-C (R^6) (R^7) SH$ である本発明化合物を塩基存在下で、一般式 $R^{29} - E$ で示される化合物又は一般式 $R^{30} N = C = Z$ で示される化合物と反応させることにより製造することができる。(式中、 R^6 、 R^7 、 R^8 、 Z 及び E は前記と同じ意味を表し、 R^{29} はアルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基、ジアルキルカルバモイルアルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、ハロアルキルカルボニル基、ジアルキルカルバモイル基、ジアルキルチオカルバモイル基又は置換されていてもよいベンゾイル基を表し、 R^{30} はアルキル基を表す。)

製造法 2 3

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)N(R^6)R^{31}$ である本発明化合物は、前記製造法 1 7 で製造される R^4 が基 $-C(R^6)(R^7)NH(R^6)$ である本発明化合物を塩基存在下で、一般式 $R^{31}-E$ で示される化合物と反応させることにより製造することができる。
(式中、 R^6 、 R^7 及び E は前記と同じ意味を表し、 R^{31} はアルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基又はハロアルキルカルボニル基を表す。)

製造法 2 4

一般式 [1] で示される化合物中、 R^5 が基 $-COR^{20}$ である本発明化合物は、 R^5 が水素原子である本発明化合物と対応する酸ハライド $R^{20}COL^1$ とをルイス酸存在下でフリーデルクラフツ反応をすることによって製造することができる。(式中、 R^{20} 及び L^1 は前記と同じ意味を表す。)

製造法 2 5

一般式 [1] で示される化合物中、 R^5 がホルミル基である本発明化合物は、 R^5 が水素原子である本発明化合物とジクロロメチルアルキルエーテルをルイス酸存在下で反応させる公知の方法 [実験化学講座 (第 4 版)、第 2 1 巻、第 1 1 0 頁] 等により製造することができる。

前記製造法 1 ないし前記製造法 4 で製造することができる R^5 がアルキル基である本発明化合物又は前記製造法 2 4 もしくは前記製造法 2 5 で製造することができる R^5 がアシル基である本発明化合物を原料として、ここまでに記載した何れか適当な製造法に準じて、 R^4 と同様に種々の R^5 の置換基を持つ本発明化合物を製造することができる。

製造法 2 6

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 又は R^5 が基 $-CSR^{20}$ である本発

明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 が基 $-COR^{20}$ である本発明化合物を五硫化リン、ローソン試薬〔2, 4-ビス(4-メトキシフェニル)-1, 3-ジチア-2, 4-ジホスフェタン-2, 4-ジスルフィド〕等でチオカルボニル化することにより製造することができる。(式中、 R^{20} は前記と同じ意味を表す。)

製造法 27

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がハロゲン原子である本発明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 が水素原子である本発明化合物を例えば臭素等のハロゲン化剤によりハロゲン化することによって製造することができる。

製造法 28

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がニトロ基である本発明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 が水素原子である本発明化合物を常法によりニトロ化することによって製造することができる。

製造法 29

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がシアノアルキル基である本発明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 がハロアルキル基である本発明化合物を例えばシアン化カリウム等のシアノ化剤でシアノ化することによって製造することができる。

製造法 30

一般式〔1〕で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がカルバモイルアルキル基である本発明化合物は、前記製造法 29 で製造される R^4 又は R^5 がシアノアルキル基である本発明化合物を酸性もしくは塩基性条件下、シアノ基を加水分解することによって製造することができる。

製造法 3 1

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がチオシアナトアルキル基である本発明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 がハロアルキル基である本発明化合物をチオシアン酸カリウム等のチオシアナト化剤でチオシアナト化することによって製造することができる。

製造法 3 2

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 又は R^5 が基 $-CR^{32}=CR^{33}R^{34}$ である本発明化合物は、前記製造法で製造される R^4 又は R^5 がアシル基 $-COR^{32}$ である本発明化合物をホスホニウム試薬 $[Ph_3P^+CHR^{33}R^{34}]L^{1-}$ と塩基存在下で反応させるウィティッヒ反応によって製造することができる。(L^1 は前記と同じ意味を表し、 R^{32} 、 R^{33} 及び R^{34} はそれぞれ同一又は相異なり、水素原子又はアルキル基を表し、 Ph_3P はトリフェニルホスフィンを表す。)

製造法 3 3

一般式 [1] で示される化合物中、 R^4 又は R^5 がアルキル基により置換されていてもよいオキシラニル基である本発明化合物は、前記製造法 3 2 で製造される R^4 又は R^5 が基 $-CR^{32}=CR^{33}R^{34}$ である本発明化合物をメタクロロ過安息香酸等の酸化剤で酸化することによって製造することができる。(R^{32} 、 R^{33} 及び R^{34} はそれぞれ前記と同じ意味を表す。)

製造法 3 4

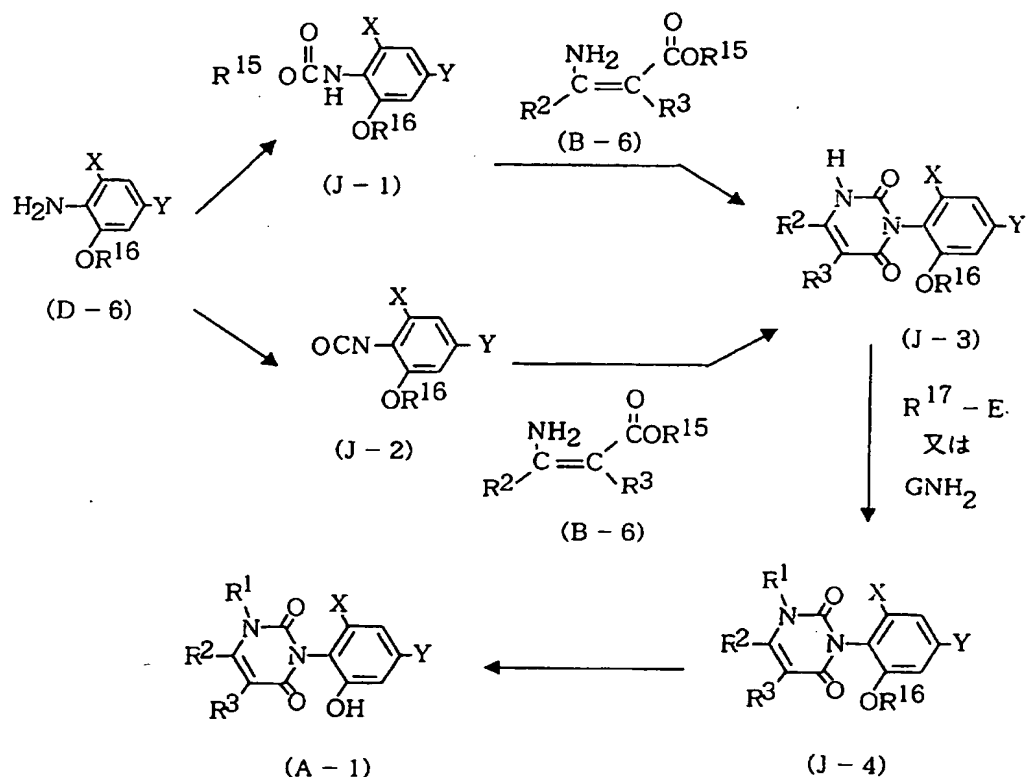
一般式 [1] で示される化合物中、 R^5 がアルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルケニルオキシ基、アルキニルオキシ基、アルコキシカルボニルアルコキシ基である本発明化合物は、 R^5 が水酸基である化合物と一般式 $R^{35}-E$ (式中、 E は前記と同じ意味を表し、 R^{35} はアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アルコキシカルボニルアルキル基又はハロアルキル基を表す。) で示される化合物とを塩基存在下で反応させることにより製造することができる。なお、

R⁵が水酸基である化合物は、前記製造法で製造されるR⁵がニトロ基である本発明化合物を例えば酢酸触媒存在下で、トルエン-水の混合溶媒中、鉄と反応させることによって製造することができる。

製造法35

一般式[1]で示される化合物中、R⁵がヒドロキシアミノ基である本発明化合物は、前記製造法で製造されるR⁵がニトロ基である本発明化合物を例えば酢酸触媒存在下で、酢酸エチル-水の混合溶媒中、鉄で還元することによって製造することができる。

なお、製造法1の原料である化合物(A-1)は、以下のようにして製造することができる。



(式中、R¹、R²、R³、R¹⁵、R¹⁶、E、G、X及びYはそれぞれ前記と同じ意味を表し、R¹⁷はアルキル基又はハロアルキル基を表す。)

前記製造法2に準じて化合物(D-6)から化合物(J-1)又は化合物(J-2)を製造した後、それぞれを化合物(B-6)と反応させることにより化合物(J-3)を製造することができる。さらに、 R^1 がアルキル基又はハロアルキル基の場合は、前記製造法3に準じて化合物(J-3)と塩基存在下で一般式 $R^{17}-E$ で示される化合物とを反応させることにより化合物(J-4)を製造するか、あるいは R^1 がアミノ基の場合は、前記製造法4に準じて化合物(J-3)と塩基存在下で一般式 $G-NH_2$ で示される化合物とを反応させることにより化合物(J-4)を製造することができる。化合物(J-4)を R^{16} がアルキル基の場合は三臭化ホウ素等の脱アルキル化剤と反応させるか、又は R^{16} が置換されてもよいベンジル基の場合は常圧下で水素添加することにより化合物(A-1)を製造することができる。

[発明を実施するための最良の形態]

以下に具体的製造例を示す。

製造例1

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号2)の合成

3-(4-クロロ-2-フルオロ-6-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル5.2g(14mmol)及びフッ化セシウム6.4g(42mmol)にN,N-ジエチルアニリン100mlを加え、180~190℃で3時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を10%塩酸水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色粉末の目的物1.4g(収率26.9%)を得た。融点196~197℃

製造例2

3-(4-クロロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号196)の合成

3-(4-クロロ-2-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 20.0 g (55.8 mmol) 及びフッ化セシウム 17.0 g (112 mmol) に N,N-ジエチルアニリン 200 ml を加え、180~190℃で2時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を10%塩酸水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 7.0 g (収率 35.0%) を得た。融点 206~207℃

製造例 3

3-(4-クロロ-2,3-ジメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 265) の合成

3-(4-クロロ-2-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 2.0 g (6.2 mmol) 及びアゾジカルボン酸ジエチル 1.3 g (7.5 mmol) をテトラヒドロフラン 30 ml に溶解し、氷冷下これにトリフェニルホスフィン 2.0 g (7.6 mmol) 及び 2-ブチン-1-オール 0.52 g (9.3 mmol) の 20 ml テトラヒドロフラン溶液を滴下した。滴下終了後、室温で30分間攪拌し、エーテル化合物を得た。次に、精製したエーテル化合物及びフッ化セシウム 0.94 g (6.2 mmol) に N,N-ジエチルアニリン 20 ml を加え、190℃で15時間加熱した。反応終了後、反応混合物をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 0.52 g (収率 22.4%) を得た。融点 152~153℃

製造例 4

3-(4,6-ジフルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 375) の合成

3-(2,4-ジフルオロ-6-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 4.7 g (13 mmol) 及びフッ化セシウム 5.9 g (39 mmol) に N,N-ジエチルアニリン 100 ml を加え、

180～190℃で3時間撹拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出し、有機層を10%塩酸水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色粉末の目的物1.0g (収率21.3%)を得た。融点176～178℃

製造例5

3-(4-クロロ-2-エチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号197) の合成

3-[4-クロロ-2-(1-メチル-2-プロピニルオキシ)フェニル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル1.25g (3.4mmol) 及びフッ化セシウム1.0g (6.8mmol) にN,N-ジエチルアニリン50mlを加え、180～190℃で30分間撹拌した。反応終了後、反応混合物を直接シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物0.60g (収率50.7%)を得た。融点159～160℃

製造例6

3-(4-クロロ-2-エチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号187) の合成

3-アミノ-4,4,4-トリフルオロクロトン酸エチル5.8g (32mmol) 及び1,8-ジアザビシクロ[5.4.0]-7-ウンデセン6.6g (43mmol) にN,N-ジメチルホルムアミド80mlを加え、室温で4-クロロ-2-エチル-6-フルオロ-7-フェノキシカルボニルアミノベンゾフラン9.6g (29mmol) を徐々に加えた。60℃で8時間撹拌後、反応液を10%塩酸水にあげ、酸性とした後、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物4.8g (収率44%)を得た。融点154～155℃

製造例 7

3-(4-クロロ-2-エチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号3)の合成

3-(4-クロロ-2-エチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-6-トリフルオロメチルウラシル0.50 g (1.3 mmol) 及び炭酸カリウム0.30 g (2.3 mmol) をN,N-ジメチルホルムアミド20 ml に懸濁し、氷冷下これにヨウ化メチル0.23 g (1.6 mmol) を滴下した。室温で3時間攪拌後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物0.48 g (収率92%)を得た。融点142~143℃

製造例 8

3-(4-クロロ-2-エチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-アミノ-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号730)の合成

3-(4-クロロ-2-エチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-6-トリフルオロメチルウラシル3.4 g (9.0 mmol)、2,4-ジニトロフェノキシアミン2.7 g (14 mmol) 及び炭酸カリウム5.0 g (36 mmol) にN,N-ジメチルホルムアミド80 ml を加え、60~70℃で1時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物2.0 g (収率58%)を得た。融点145~147℃

製造例 9

3-(2-ブロモメチル-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(A, 化合物番号8)、3-

(4-クロロ-2-ジブロモメチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (B, 化合物番号9) 及び3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-トリブロモメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (C, 化合物番号10) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 20.0 g (53.1 mmol)、N-ブロモコハク酸イミド 56.8 g (319.1 mmol)、過酸化ベンゾイル 0.2 g (1.4 mmol) 及び α, α' -アゾビスイソブチロニトリル 0.2 g (1.2 mmol) に四塩化炭素 400 ml を加え、加熱還流下 24 時間攪拌した。反応終了後、反応液を冷却後、析出した結晶をろ別し、ろ液を、亜硫酸水素ナトリウム水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した。無水硫酸マグネシウムで乾燥後、溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて分離し、白色結晶の (A) 5.0 g (収率 20.6%) 融点 168~172°C、白色結晶の (B) 12.0 g (収率 42.3%) 融点 126~128°C 及び濃褐色粘稠液体の (C) 0.6 g (収率 1.8%) 屈折率: 測定不可をそれぞれ得た。化合物番号10の $^1\text{H-NMR}$ (溶媒、 CDCl_3): 3.61 (3H, bs)、6.42 (1H, s)、7.26 (1H, d) ppm

製造例 10

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号33) の合成

3-(4-クロロ-2-ジブロモメチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 12.0 g (22.5 mmol) に濃硫酸 60 ml を加え、50°C で 1 時間攪拌した。反応終了後、反応液を氷水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を飽和炭酸水素ナトリウム水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をイソプロピルエーテルで結晶化させ、淡黄色結晶の目的物 7.6 g (収率 88.4%) を得た。融点 180~183°C

製造例 1 1

3-(2-カルボキシ-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号42)の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-トリブロモメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.6 g (0.98 mmol) に濃硫酸 10 ml を加え、45℃で3時間攪拌した。反応終了後、反応液を氷水にあけ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 0.21 g (収率 53.7%) を得た。融点 267~268℃ (分解)

製造例 1 2

3-(2-カルボキシ-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号42)の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.5 g (3.84 mmol) をアセトン 20 ml に溶解し、5℃でジョーンズ試薬を橙色が消えなくなるまで滴下した。反応終了後、反応液を水にあけ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 1.2 g (収率 76.9%) を得た。融点 267~268℃ (分解)

製造例 1 3

3-(4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号1)の合成

3-(2-カルボキシ-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 7.0 g (17 mmol) 及び

銅粉 5.0 g (79 mmol) をキノリン 50 ml に懸濁し、200℃で1時間攪拌した。反応終了後、反応液をろ過し、ろ液を酢酸エチルで抽出した。有機層を10%塩酸水溶液及び水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し白色結晶の目的物 3.5 g (収率 56%) を得た。融点 127 ~ 128℃

製造例 14

3-(4-クロロ-2-プロピオニル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 29) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.3 g (1.4 mmol) 及び塩化アルミニウム 1.9 g (1.4 mmol) をニトロメタン 20 ml に溶解し、氷冷下これに塩化プロピオニル 0.5 g (1.4 mmol) を滴下した。滴下終了後、室温で12時間攪拌した。反応終了後、反応液を希塩酸と氷の混合物にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄色ガラス状物質の目的物 0.33 g (収率 56%) を得た。屈折率：測定不可、¹H-NMR (溶媒、CDCl₃) : 1.20 (3H, m)、2.91 (2H, q)、3.56 (3H, s)、6.38 (1H, s)、7.28 (1H, d)、7.58 (1H, s) ppm

製造例 15

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-メトキシイミノエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 37) の合成

3-(2-アセチル-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.4 g (1 mmol)、酢酸カリウム 0.4 g (4 mmol) 及びメトキシアミン塩酸塩 0.33 g

(4 mmol) にメタノール 20 ml を加え、室温で 12 時間攪拌した。反応終了後、減圧下で溶媒を留去し、得られた残渣を直接シリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色粉末の目的物 0.28 g (収率 64.6%) を得た。融点 176~178°C

製造例 16

3-(4-クロロ-2-メチルヒドラゾノメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 231) の合成

3-(4-クロロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.4 g (1.0 mmol) をテトラヒドロフラン 5 ml に溶解し、氷冷下これにモノメチルヒドラジン 0.1 g (21.7 mmol) を加え、室温で 3 時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色ガラス状物質の目的物 0.2 g (収率 47.6%) を得た。屈折率：測定不可、¹H-NMR (溶媒、CDCl₃) : 2.90 (3H, s)、3.52 (3H, s)、6.18 (1H, bs)、6.40 (1H, s)、6.85 (1H, s)、7.05 (1H, d)、7.25 (1H, s)、7.29 (1H, d) ppm

製造例 17

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-ヒドロキシエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 13) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 4.0 g (10.2 mmol) をテトラヒドロフラン 20 ml に溶解し、-65°C でこれにメチルマグネシウムブロミド (1.0 M テトラヒドロフラン溶液) 12.3 ml を滴下した。室温で 1 時間攪拌後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食

塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色結晶の目的物 2.3 g (収率 55.3%) を得た。融点 154 ~ 157 °C

製造例 18

3-(2-アセチル-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 28) の合成

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-ヒドロキシエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.5 g (3.7 mmol) をアセトン 20 ml に溶解し、5 °C でジョーンズ試薬を橙色が消えなくなるまで滴下した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡橙色結晶の目的物を定量的に得た。融点 193 ~ 194 °C

製造例 19

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ヒドロキシメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 12) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.5 g (3.8 mmol) をテトラヒドロフラン 10 ml に溶解し、窒素気流下 5 °C でこれにジイソブチルアルミニウムハイドライド (0.94 M ヘキサン溶液) 4.5 ml を滴下した。室温で 1 時間攪拌後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色結晶の目的物 1.4 g (収率 90.7%) を得た。融点 198 ~ 199 °C

製造例 20

3-[4-クロロ-2-(1-クロロエチル)-6-フルオロベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号393)の合成

3-[4-クロロ-2-(1-ヒドロキシエチル)-6-フルオロベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル0.50g(1.2mmol)及びトリフェニルホスフィン0.64g(2.5mmol)をアセトニトリル20mlに溶解し、室温でこれにクロラニル0.60g(2.5mmol)を加えた。室温で2時間攪拌した後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び5%炭酸カリウム水溶液の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡褐色ガラス状物質の目的物0.50g(収率96.2%)を得た。屈折率1.5639(20℃)

製造例21

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メトキシメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号14)の合成

3-(2-ブロモメチル-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル1.5g(3.3mmol)をテトラヒドロフラン30mlに溶解し、氷冷下これにナトリウムメトキシド(28%メタノール溶液)0.7g(3.6mmol)を滴下した。室温で5分間攪拌した後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄褐色ガラス状物質の目的物0.75g(収率56.0%)を得た。屈折率1.5389(20℃)

製造例22

3-(4-クロロ-2-エチルチオメチル-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号22)の合成

3-(2-ブロモメチル-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.5 g (3.3 mmol) 及び炭酸カリウム 0.7 g (5.1 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド 20 ml に懸濁し、室温でこれにエチルメルカプタン 0.21 g (3.4 mmol) を加え、さらに室温で 1 時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄褐色ガラス状物質の目的物 1.2 g (収率 83.4%) を得た。屈折率 1.5629 (20℃)

製造例 23

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルスルホニルメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 21) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルチオメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.5 g (1.2 mmol) 及びメタクロ過安息香酸 0.6 g (3.5 mmol) をクロロホルムに懸濁し、室温で 1 時間攪拌した。反応終了後、反応液に酢酸エチルを加え、水及び 10% 亜硫酸水素ナトリウム水溶液の順で洗浄した後、有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 0.5 g (収率 92.9%) を得た。融点 209~211℃

製造例 24

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メトキシカルボニルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 43) の合成

3-(2-カルボキシ-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.21 g (0.5 mmol)

及び炭酸カリウム 0.16 g (1.1 mmol) を N, N-ジメチルホルムアミド 10 ml に懸濁し、室温でこれにヨウ化メチル 0.15 g (1.1 mmol) を加え、室温で 3 時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄土色結晶の目的物 0.21 g (収率 96.8%) を得た。融点 194~196℃

製造例 25

3-(4-クロロ-2-エチルカルバモイルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 248) の合成

3-(2-カルボキシ-4-クロロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.37 g (0.96 mmol) に塩化チオニル 10 ml を加え、加熱還流下 3 時間攪拌した。反応終了後、減圧下で塩化チオニルを留去し、得られた残渣をテトラヒドロフラン 20 ml に溶解した。この溶液に氷冷下、エチルアミン (70% 水溶液) 0.24 g (3.84 mmol) を加え、さらに室温で 10 分間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、析出した結晶をろ過し、白色結晶の目的物 0.31 g (収率 78.3%) を得た。融点 225~226℃

製造例 26

3-(2-アセトキシメチル-4-クロロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 210) の合成

3-(4-クロロ-2-ヒドロキシメチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.4 g (1.1 mmol) 及びトリエチルアミン 0.13 g (1.2 mmol) をテトラヒドロフラン 20 ml に溶解し、氷冷下これに塩化アセチル 0.1 g (1.2 mmol) を滴下した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで洗浄した。有機層を 10% 塩酸水溶液、水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下

で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色固体の目的物 0.2 g (収率 45.5%) を得た。融点 135 ~ 138 °C

製造例 27

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-ジメチルアミノエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 572) の合成

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-メチルアミノエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.5 g (1.2 mmol) 及び炭酸カリウム 0.40 g (2.9 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド 50 ml に懸濁し、これにヨウ化メチル 1.0 g (7.0 mmol) を加え、60 °C で 2 時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、紫色ガラス状物質の目的物 0.35 g (収率 68%) を得た。屈折率 1.5341 (20 °C)

製造例 28

3-(3-アセチル-4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 101) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.6 g (4.2 mmol) をニトロメタン 50 ml に溶解し、室温でこれに塩化アルミニウム 5.6 g (42 mmol) を加え、さらに塩化アセチル 3.3 g (42 mmol) を滴下した。滴下終了後、加熱還流下 5 時間攪拌した。反応終了後、反応液を希塩酸と水の混合物にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られ

た残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色結晶の目的物

1. 2 g (収率 66. 7%) を得た。融点 138~140℃

製造例 29

3-(4-クロロ-6-フルオロ-3-ホルミル-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 91) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 2. 0 g (5. 3 mmol) 及びジクロロメチルメチルエーテル 36. 5 g (0. 32 mol) をジクロロメタン 100 ml に溶解し、0℃でこれに四塩化スズ (1 M ジクロロメタン溶液) 200 ml (0. 20 mol) を滴下した。滴下終了後、室温で 2 時間攪拌した。反応終了後、反応液を希塩酸と氷の混合物にあげ、ジクロロメタンで抽出した。有機層を水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 19. 5 g (収率 90. 7%) を得た。融点 148~150℃

製造例 30

3-[4-クロロ-6-フルオロ-3-(1-メトキシイミノエチル)-2-メチルベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 111) の合成

3-(3-アセチル-4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0. 4 g (1 mmol)、酢酸カリウム 0. 5 g (5 mmol) 及びメトキシアミン塩酸塩 0. 5 g (6 mmol) にメタノール 50 ml を加え、室温で 12 時間、さらに加熱還流下 8 時間攪拌した。反応終了後、減圧下でメタノールを留去した後、得られた残渣に酢酸エチルを加え、水及び飽和食塩水の順で洗浄した。有機層を無水硫酸ナトリウムで乾燥後、減圧下で溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色結晶の目的物 0. 4 g (収率

100%)を得た。融点65~67℃、¹H-NMR (溶媒、CDCl₃): 1.54 (1H, s)、2.21 (3H, s)、2.35 (3H, s)、3.59 (3H, s)、3.91 (3H, s)、6.41 (1H, s)、7.16 (1H, d) ppm

製造例31

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-メチル-3-チオアセチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号631) の合成

3-(3-アセチル-4-クロロ-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル0.50 g (1.2 mmol) 及び五硫化リン1.5 g (6.7 mmol) にトルエン100 ml を加え、加熱還流下2時間攪拌した。反応終了後、反応液にさらにトルエン100 ml を加え、有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、橙色ガラス状物質の目的物47 mg (収率9%)を得た。屈折率1.5967 (20℃)

製造例32

3-(3-ブロモ-4-クロロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号272) の合成

3-(4-クロロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル1.0 g (2.8 mmol) を酢酸30 ml に溶解し、室温でこれに臭素0.9 g (5.6 mmol) を滴下した。滴下終了後、40℃で6時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。水及び10%アンモニア水の順で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色のガラス状物質0.6 g (収率50.0%)を得た。屈折率1.5632 (20℃)

製造例 3 3

3 - (4 - クロロ - 2 - メチル - 3 - ニトロベンゾフラン - 7 - イル) - 1 - メチル - 6 - トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 3 0 3) の合成

3 - (4 - クロロ - 2 - メチルベンゾフラン - 7 - イル) - 1 - メチル - 6 - トリフルオロメチルウラシル 0.5 g (1.4 mmol) を濃硫酸 10 ml に溶解し、-20℃でこれに60%硝酸0.1 g (1.1 mmol) を滴下した。-20℃で10分間攪拌後、反応液を氷水にあげ、クロロホルム 50 ml で抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し淡黄色結晶の目的物 0.3 g (収率 53.3%) を得た。融点 174 ~ 175℃

製造例 3 4

3 - [4 - クロロ - 2 - (1 - シアノエチル) - 3 - エトキシカルボニル - 6 - フルオロベンゾフラン - 7 - イル] - 1 - メチル - 6 - トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 6 7 1) の合成

3 - [4 - クロロ - 2 - (1 - クロロエチル) - 3 - エトキシカルボニル - 6 - フルオロベンゾフラン - 7 - イル] - 1 - メチル - 6 - トリフルオロメチルウラシル 0.8 g (1.6 mmol)、シアン化カリウム 0.16 g (2.5 mmol) 及び炭酸カリウム 0.40 g (2.9 mmol) に N, N - ジメチルホルムアミド 20 ml を加え、室温で3時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄色ガラス状物質の目的物 0.58 g (収率 74%) を得た。屈折率 1.5348 (20℃)

製造例 3 5

3 - (3 - カルバモイルメチル - 4 - クロロ - 6 - フルオロ - 2 - メチルベンゾ

フラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号619)の合成

3-(4-クロロ-3-シアノメチル-6-フルオロ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.50 g (1.2 mmol) を 50% 硫酸 30 ml に溶解し、60℃で2時間撹拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 0.39 g (収率 75%) を得た。融点 127~129℃

製造例 36

3-[4-クロロ-6-フルオロ-2-(1-チオシアナトエチル)ベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号577)の合成

3-[2-(1-ブロモエチル)-4-クロロ-6-フルオロベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 2.3 g (4.9 mmol) 及びチオシアン酸カリウム 1.5 g (2.3 mmol) にエタノール 30 ml を加え、60℃で2時間撹拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄色結晶の目的物 1.1 g (収率 50%) を得た。融点 60~63℃、¹H-NMR (溶媒、CDCl₃): 1.93 (3H, d)、3.59 (3H, s)、4.56 (1H, q)、6.40 (1H, d)、6.87 (1H, s)、7.25 (1H, s) ppm

製造例 37

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ビニルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル(化合物番号412)の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ホルミルベンゾフラン-7-イル)-

1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.0 g (2.6 mmol)、メチルトリフェニルホスホニウムブロミド 0.94 g (2.6 mmol) 及び炭酸カリウム 0.43 g (3.1 mmol) にジオキサン 50 ml、水 0.5 ml を加えた。加熱還流下 2 時間攪拌した。反応終了後、反応液を水にあげ、クエン酸水溶液で pH 3 に調整した後、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、黄色結晶の目的物 0.51 g (収率 51%) を得た。融点 108~109℃

製造例 38

3-[4-クロロ-2-(2-オキシラニル)-6-フルオロベンゾフラン-7-イル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 606) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-2-ビニルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.4 g (1.0 mmol) にクロロホルム 50 ml を加え、室温でこれに 80% メタクロ過安息香酸 0.21 g (1.0 mmol) のクロロホルム 10 ml 溶液を滴下した。室温で 12 時間攪拌後、反応液を水にあげ、クロロホルムで抽出した。有機層を水、10% 亜硫酸水素ナトリウム水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 85 mg (収率 21%) を得た。融点 109~111℃

製造例 39

3-(4-クロロ-6-フルオロ-3-メトキシ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 427) の合成

3-(4-クロロ-6-フルオロ-3-ヒドロキシ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 0.50 g

(1.3 mmol) 及びフッ化セシウム 2.0 g (1.3 mmol) を N, N-ジメチルホルムアミド 10 ml に懸濁し、これにヨウ化メチル 0.3 g (2.1 mmol) を加え、70℃で1時間攪拌した。反応終了後、反応液に酢酸エチルを加え、有機層を水で洗浄した後、無水硫酸ナトリウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 0.19 g (収率 35%) を得た。融点 57~60℃

製造例 40

3-(4-クロロ-3-ヒドロキシアミノ-2-メチルベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル (化合物番号 305) の合成

3-(4-クロロ-2-メチル-3-ニトロベンゾフラン-7-イル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 2.3 g (5.7 mmol) 及び鉄粉 1.6 g (28 mmol) に酢酸 5 ml、酢酸エチル 200 ml 及び水 100 ml を加え、加熱還流下 2 時間攪拌した。反応終了後、不溶物をろ過し、有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、淡黄色結晶の目的物 1.2 g (収率 54%) を得た。融点 134~136℃

参考例 1

3-(4-クロロ-2-フルオロ-6-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(4-クロロ-2-フルオロ-6-メトキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 5.7 g (16 mmol) をジクロロメタン 100 ml に溶解し、0℃で三臭化ホウ素 (3.0 M ジクロロメタン溶液) 27 ml (80 mmol) を滴下した。室温で 3 時間攪拌後、反応液を氷水にあげ、炭酸水素ナトリウムで中和した。ジクロロメタンで抽出し、有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒

を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し、白色結晶の目的物 5.4 g (収率 98.2%) を得た。融点 143~144℃

参考例 2

3-(4-クロロ-2-フルオロ-6-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(4-クロロ-2-フルオロ-6-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 5.4 g (16 mmol) 及び炭酸カリウム 3.3 g (24 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド 50 ml に懸濁し、室温で臭化プロパルギル 2.7 g (22 mmol) を滴下した。60~70℃で 5 時間攪拌した後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し、白色結晶の目的物 5.2 g (収率 86.7%) を得た。融点 150~152℃

参考例 3

3-(4-クロロ-2-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(4-クロロ-2-メトキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 41.0 g (122.5 mmol) をジクロロメタン 1000 ml に溶解し、-10℃~-5℃で三臭化ホウ素 (1.0 M ジクロロメタン溶液) 470 ml (470.8 mmol) を滴下した。室温で 3 時間攪拌後、反応液を氷水にあげ、炭酸水素ナトリウムで中和した。ジクロロメタンで抽出し、有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し、白色結晶の目的物 27.6 g (収率 70.3%) を得た。融点 198~202℃

参考例 4

3-(4-クロロ-2-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(4-クロロ-2-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 2.6 g (7.0 mmol) 及び炭酸カリウム 14.5 g (105.1 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド 150 ml に懸濁し、室温で臭化プロパルギル 11.2 g (94.1 mmol) を滴下した。70℃で2時間攪拌した後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し淡茶色粉末の目的物 2.5 g (収率 89.0%) を得た。融点 147~148℃

参考例 5

3-(2,4-ジフルオロ-6-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(2,4-ジフルオロ-6-メトキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 13.6 g (40 mmol) をジクロロメタン 150 ml に溶解し、0℃で三臭化ホウ素 (3.0 M ジクロロメタン溶液) 66.7 ml (200 mmol) を滴下した。室温で3時間攪拌後、反応液を氷水にあげ、炭酸水素ナトリウムで中和した。ジクロロメタンで抽出し、有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し、白色結晶の目的物 9.8 g (収率 75.4%) を得た。融点 195~196℃

参考例 6

3-(2,4-ジフルオロ-6-プロパルギルオキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(2,4-ジフルオロ-6-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 4.8 g (15 mmol) 及び炭酸カリウム 3.2 g (23 mmol) を N,N-ジメチルホルムアミド 50 ml に懸濁し、室温で臭

化プロパルギル 2.5 g (21 mmol) を滴下した。60～70℃で5時間攪拌した後、反応液を水にあげ、酢酸エチルで抽出した。有機層を水及び飽和食塩水の順で洗浄した後、無水硫酸マグネシウムで乾燥した。減圧下で溶媒を留去した後、得られた粗結晶をイソプロピルエーテルで洗浄し、黄土色粉末の目的物 5.0 g (収率 92.63%) を得た。融点 159～162℃

参考例 7

3-[4-クロロ-2-(1-メチル-2-プロピニルオキシ)フェニル]-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシルの合成

3-(4-クロロ-2-ヒドロキシフェニル)-1-メチル-6-トリフルオロメチルウラシル 1.7 g (5.3 mmol)、1-ブチン-3-オール 0.63 g (9.0 mmol) 及びトリフェニルホスフィン 1.57 g (6.0 mmol) をテトラヒドロフラン 100 ml に溶解し、氷冷下アゾジカルボン酸ジエチル 1.0 g (6.0 mmol) を滴下した。室温で1時間攪拌後、溶媒を留去し、得られた残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィーにて精製し、白色結晶の目的物 1.86 g (収率 93.9%) を得た。融点 96～99℃

次に、本発明化合物のいくつかについて $^1\text{H-NMR}$ データを以下に示す。

(表 2 5)

化合物 番号	$^1\text{H-NMR}$ δ 値 (ppm) 溶媒 CDCl_3
10	3. 61 (3H, bs) 6. 42 (1H, s) 7. 26 (1H, d)
20	2. 11 (3H, s) 3. 59 (3H, s) 3. 73 (2H, s) 6. 40 (1H, s) 6. 70 (1H, s) 7. 19 (1H, d)
29	1. 20 (3H, m) 2. 91 (2H, q) 3. 56 (3H, s) 6. 38 (1H, s) 7. 28 (1H, d) 7. 58 (1H, s)
30	1. 01 (3H, t) 1. 78 (2H, m) 2. 87 (2H, t) 3. 59 (3H, s) 6. 41 (1H, s) 7. 36 (1H, d) 7. 57 (1H, s)
35	3. 60 (3H, s) 4. 02 (3H, s) 6. 42 (1H, s) 7. 07 (1H, s) 7. 24 (1H, d) 8. 00 (1H, s)
45	1. 37 (6H, d) 3. 57 (3H, s) 5. 26 (1H, m) 6. 39 (1H, s) 7. 29 (1H, d) 7. 56 (1H, s)
79	2. 29 (1H, bs) 2. 40 (3H, s) 3. 57 (3H, s) 4. 78 (1H, s) 6. 38 (1H, s) 7. 17 (1H, d)
80	2. 05 (3H, s) 2. 43 (3H, s) 3. 57 (3H, s) 5. 27 (2H, s) 6. 35 (1H, s) 7. 15 (1H, d)
86	2. 69 (3H, s) 3. 60 (3H, s) 6. 43 (1H, s) 7. 29 (1H, d) 8. 00 (1H, bs)
89	1. 38 (6H, d) 2. 58 (3H, s) 3. 55 (3H, s) 5. 26 (1H, m) 6. 35 (1H, s) 7. 20 (1H, d)
111	1. 54 (1H, s) 2. 21 (3H, s) 2. 35 (3H, s) 3. 59 (3H, s) 3. 91 (3H, s) 6. 41 (1H, s) 7. 16 (1H, d)
119	2. 73 (3H, s) 3. 57 (3H, s) 6. 37 (1H, s) 7. 32 (1H, d)
141	1. 30 (3H, s) 3. 16 (2H, q) 3. 61 (3H, s) 6. 42 (1H, s) 7. 31 (1H, d) 10. 73 (1H, s)
207	1. 60 (3H, d) 2. 59 (1H, m) 3. 57 (3H, s) 4. 97 (1H, m) 6. 40 (1H, s) 6. 78 (1H, s) 7. 09 (1H, d) 7. 32 (1H, d)

(表 2 6)

化合物 番号	¹ H-NMR δ 値(ppm) 溶媒 CDCl ₃
231	2.90(3H, s) 3.52(3H, s) 6.18(1H, bs) 6.40(1H, s) 6.85(1H, s) 7.05(1H, d) 7.25(1H, s) 7.29(1H, d)
247	3.17(6H, dd) 3.57(3H, s) 6.39(1H, s) 7.25(1H, d) 7.39(1H, d)
270	2.33(3H, s) 3.60(3H, bs) 6.40(1H, s) 7.0~7.5(7H, m)
334	1.23(6H, d) 3.43(1H, m) 3.57(3H, s) 6.37(1H, s) 7.18(1H, d)
376	2.67(3H, s) 3.60(3H, s) 6.36(1H, s) 7.21(1H, d) 7.38(1H, d)
401	0.97(3H, m) 1.92(2H, m) 2.34(1H, m) 3.57(3H, s) 4.66(1H, m) 6.37(1H, s) 6.72(1H, s) 7.19(1H, d)
446	0.99(3H, t) 1.20(3H, d) 1.68(2H, m) 2.67(2H, t) 3.31(1H, m) 3.60(3H, s) 6.41(1H, s) 7.22(1H, d)
460	1.16(3H, t) 1.30(3H, t) 2.89(2H, q) 3.29(2H, q) 3.61(3H, s) 6.42(1H, s) 7.24(1H, d)
463	0.88(3H, m) 1.24(3H, t) 1.93(2H, m) 2.57, 2.73(1H, d) 2.81(2H, m) 3.52, 3.55(3H, s) 4.67(1H, m) 6.30, 6.36(1H, s) 7.15(1H, d)
464	0.94(3H, t) 1.27(3H, t) 1.0~2.0(4H, m) 2.17(1H, m) 2.86(2H, m) 3.54, 3.57(3H, s) 4.79(1H, m) 6.35, 6.38(1H, s) 7.15(1H, d)
471	1.33(3H, t) 1.74~1.78(3H, m) 2.48~2.74(2H, m) 3.60(3H, s) 3.99~4.13(1H, m) 6.40(1H, d) 6.82(1H, s) 7.24(1H, dd)
472	1.30(3H, t) 1.80(3H, d) 3.0(2H, m) 3.55(3H, s) 4.40(1H, q) 6.45(1H, d) 7.00(1H, s) 7.24(1H, d)

(表 27)

化合物 番号	$^1\text{H-NMR}$ δ 値 (ppm) 溶媒 CDCl_3
475	1.03 (3H, t) 1.86 (5H, m) 2.87 (2H, m) 3.60 (3H, m) 4.36 (1H, q) 6.39 (1H, d) 7.00 (1H, s) 7.27 (1H, d)
483	1.10 (3H, t) 2.20 (1H, m) 2.50 (1H, m) 2.80 (3H, s) 3.60 (3H, s) 4.20 (1H, m) 6.45 (1H, d) 7.05 (1H, s) 7.20 (1H, d)
484	1.10 (3H, t) 2.20 (1H, m) 2.50 (1H, m) 2.70 (3H, s) 3.60 (3H, s) 4.10 (1H, m) 6.20 (1H, d) 7.0 (1H, s) 7.20 (1H, d)
485	1.09 (3H, m) 1.19 (3H, t) 1.96 (2H, m) 2.45 (2H, m) 3.58 (3H, s) 3.82 (1H, t) 6.40 (1H, d) 6.68 (1H, d) 7.17 (1H, d)
486	1.05 (3H, t) 1.30 (3H, t) 2.56 (4H, m) 3.59 (3H, s) 3.81 (1H, m) 6.46 (1H, d) 6.82 (1H, d) 7.22 (1H, d)
505	1.15 (6H, m) 1.28 (3H, m) 2.81 (3H, m) 3.59 (3H, s) 4.16 (1H, m) 6.40 (1H, d) 7.09 (1H, d) 7.26 (1H, d)
510	0.86 (3H, t) 1.71 (3H, s) 2.10 (1H, m) 2.35 (1H, m) 2.66 (3H, d) 3.51 (3H, s) 6.31 (1H, s) 6.92 (1H, s) 7.18 (1H, d)
511	0.97 (3H, t) 1.17 (1H, m) 1.43 (1H, m) 1.80 (3H, s) 2.09 (1H, m) 2.32 (1H, m) 2.73 (3H, d) 3.59 (3H, s) 6.39 (1H, d) 6.97 (1H, s) 7.24 (1H, d)
515	1.80 (3H, d) 3.60 (3H, s) 4.60 (1H, m) 6.40 (1H, s) 6.80 (1H, s) 7.20 (1H, d)
549	1.59 (6H, s) 2.91 (1H, bs) 3.55 (3H, s) 6.33 (1H, s) 6.65 (1H, s) 7.17 (1H, d)
551	1.42 (3H, d) 3.58 (3H, s) 5.35 (1H, m) 6.39, 6.43 (1H, s) 6.75 (1H, s) 6.80 (1H, bs) 7.25 (1H, d)

(表 28)

化合物 番号	$^1\text{H-NMR}$ δ 値(ppm) 溶媒 CDCl_3
571	1.45(3H, d) 2.40(3H, s) 3.10(1H, s) 3.60(3H, s) 3.90(1H, q) 6.40(1H, s) 6.70(1H, s) 7.15(1H, d)
577	1.93(3H, d) 3.59(3H, s) 4.56(1H, q) 6.40(1H, d) 6.87(1H, s) 7.25(1H, s)
585	0.90(3H, t) 1.54(3H, d) 3.45(2H, m) 3.58(3H, s) 4.52(1H, m) 6.38(1H, d) 6.73(1H, s) 7.20(1H, d)
586	0.88(3H, t) 1.5~1.6(6H, m) 3.38(2H, m) 3.56(3H, s) 4.55(1H, m) 6.39(1H, d) 6.73(1H, s) 7.18(1H, d)
623	2.44(3H, s) 3.58(3H, s) 3.80(3H, s) 4.64(2H, s) 6.40(1H, s) 7.15(1H, d)
624	1.62(3H, d) 2.41(3H, s) 3.59(3H, s) 3.75(3H, s) 4.73(1H, q) 6.40(1H, s) 7.15(1H, d)
635	2.44(3H, s) 3.54(3H, s) 5.32~5.50(2H, dd) 6.36(1H, s) 7.00~7.15(2H, m)
646	0.96(6H, d) 2.14(1H, m) 3.03(2H, m) 3.59(3H, s) 6.41(1H, s) 7.31(1H, d) 10.7(1H, s)
647	0.94(6H, d) 2.07(1H, m) 2.84(2H, d) 3.59(3H, s) 3.93(3H, s) 6.40(1H, s) 7.25(1H, d)
649	0.91(3H, m) 1.33~1.38(4H, m) 1.66~1.73(2H, m) 3.12(2H, m) 3.60(1H, s) 6.41(1H, s) 7.30(1H, d)
655	3.59(3H, s) 3.92(3H, s) 6.40(1H, s) 7.31(1H, d) 8.20(1H, s)
656	2.56(3H, s) 3.56(3H, s) 4.03(3H, s) 6.41(1H, s) 7.32(1H, d)

(表 29)

化合物 番号	$^1\text{H-NMR}$ δ 値 (ppm) 溶媒 CDCl_3
657	1.56 (3H, d) 3.57 (4H, m) 3.96 (3H, s) 5.18 (1H, m) 6.37 (1H, d) 7.28 (1H, d)
661	1.44 (3H, t) 2.96 (3H, s) 3.58 (3H, s) 4.46 (2H, q) 4.73 (2H, s) 6.39 (1H, s) 7.34 (1H, d)
664	1.37 (3H, t) 1.43 (3H, t) 3.08 (2H, q) 3.58 (3H, s) 4.45 (2H, q) 4.71 (2H, s) 6.39 (1H, s) 7.34 (1H, d)
666	1.46 (3H, t) 3.58 (3H, s) 4.53 (2H, q) 6.40 (1H, s) 7.39 (1H, d) 10.04 (1H, s)
670	1.43 (3H, t) 1.88 (3H, d) 3.60 (3H, s) 4.45 (2H, q) 5.62 (1H, q) 6.41 (1H, s) 7.29 (1H, d)
678	1.50 (3H, d) 3.30 (3H, d) 3.60 (3H, s) 4.40 (1H, m) 6.40 (1H, d) 6.80 (1H, s) 6.90 (1H, dd)
684	1.8 (3H, dd) 2.75 (3H, s) 3.80 (3H, s) 4.20 (1H, q) 6.20 (1H, d) 7.00 (2H, m)
688	1.38 (3H, t) 1.80 (3H, dd) 2.90 (2H, m) 3.60 (3H, d) 4.40 (1H, q) 6.40 (1H, d) 7.00 (2H, m) 7.20 (1H, s)
691	0.89 (3H, m) 1.84 (2H, m) 3.27 (3H, s) 3.53 (3H, s) 4.13 (1H, q) 6.35 (1H, d) 6.72 (1H, d) 6.87 (1H, dd)
694	1.04 (3H, t) 1.31 (3H, t) 2.17 (1H, m) 2.45 (1H, m) 2.87 (2H, m) 3.58 (3H, s) 4.19 (1H, m) 6.39 (1H, d) 6.96 (1H, dd) 7.03 (1H, d)
712	1.00 (2H, t) 1.90 (2H, m) 2.60 (1H, bs) 3.50 (3H, s) 3.60 (1H, q) 6.30 (1H, s) 6.60 (1H, s) 7.40 (1H, d)

(表 30)

化合物 番号	$^1\text{H-NMR}$ δ 値 (ppm) 溶媒 CDCl_3
713	1.53 (3H, d) 3.31 (3H, d) 3.58 (3H, s) 4.45 (1H, m) 6.39 (1H, d) 6.70 (1H, s) 7.35 (1H, d)
717	1.82 (3H, dd) 2.82 (3H, s) 3.57 (3H, s) 4.37 (1H, q) 6.39 (1H, d) 6.96 (1H, s) 7.41 (1H, d)
720	1.35 (3H, m) 1.83 (3H, dd) 2.92 (2H, m) 3.59 (3H, s) 4.39 (1H, q) 6.39 (1H, d) 6.95 (1H, s) 7.40 (1H, d)
750	1.33 (3H, t) 2.80 (2H, q) 3.70 (3H, s) 6.35 (1H, s) 6.47 (1H, s) 7.23 (1H, d)
752	1.63 (3H, d) 3.07 (2H, m) 3.56 (3H, d) 4.27 (1H, q) 6.37 (1H, d) 6.71 (1H, d) 7.19 (1H, d)
757	1.11 (3H, m) 2.20 (1H, m) 2.54 (1H, m) 3.53~3.62 (4H, m) 3.86 (1H, m) 4.36 (1H, m) 6.38 (1H, d) 7.05 (1H, s) 6.26 (1H, d)
764	0.85 (3H, m) 1.82 (2H, m) 3.24 (3H, s) 3.51 (3H, s) 4.11 (1H, q) 6.32 (1H, d) 6.98 (1H, d) 7.12 (1H, d)
765	1.61 (3H, d) 3.73 (3H, s) 3.79 (2H, m) 4.73 (1H, m) 6.38 (1H, s) 6.81 (1H, s) 7.23 (1H, d)
766	1.54 (3H, d) 3.58 (3H, s) 3.71 (2H, m) 4.45 (1H, m) 4.64 (2H, m) 6.39 (1H, s) 6.78 (1H, s) 7.19 (1H, d)
770	1.22~1.28 (6H, m) 1.79 (3H, dd) 3.59 (3H, s) 3.66~4.07 (4H, dd) 5.47 (1H, m) 6.39 (1H, d) 6.79 (1H, s) 7.16 (1H, d)
771	0.93 (3H, m) 1.84 (2H, m) 3.31 (3H, s) 3.57 (3H, s) 4.17 (1H, q) 6.38 (1H, q) 6.75 (1H, d) 6.90 (1H, dd)

本発明の除草剤は、一般式〔1〕で示されるベンゾフラン-7-イルウラシル

誘導体を有効成分としてなる。

本発明化合物を除草剤として使用するには本発明化合物それ自体で用いてもよいが、製剤化に一般的に用いられる担体、界面活性剤、分散剤または補助剤等を配合して、粉剤、水和剤、乳剤、微粒剤または粒剤等に製剤して使用することもできる。

製剤化に際して用いられる担体としては、例えばタルク、ベントナイト、クレー、カオリン、珪藻土、ホワイトカーボン、バーミキュライト、炭酸カルシウム、消石灰、珪砂、硫安、尿素等の固体担体、イソプロピルアルコール、キシレン、シクロヘキサン、メチルナフタレン等の液体担体等があげられる。

界面活性剤及び分散剤としては、例えばアルキルベンゼンスルホン酸金属塩、ジナフチルメタンジスルホン酸金属塩、アルコール硫酸エステル塩、アルキルアリアルスルホン酸塩、リグニンスルホン酸塩、ポリオキシエチレングリコールエーテル、ポリオキシエチレンアルキルアリアルエーテル、ポリオキシエチレンソルビタンモノアルキレート等があげられる。補助剤としては、例えばカルボキシメチルセルロース、ポリエチレングリコール、アラビアゴム等があげられる。使用に際しては適当な濃度に希釈して散布するかまたは直接施用する。

本発明の除草剤は茎葉散布、土壌施用または水面施用等により使用することができる。有効成分の配合割合については必要に応じて適宜選ばれるが、粉剤または粒剤とする場合は0.01～10%（重量）、好ましくは0.05～5%（重量）の範囲から適宜選ぶのがよい。また、乳剤及び水和剤とする場合は1～50%（重量）、好ましくは5～30%（重量）の範囲から適宜選ぶのがよい。

本発明の除草剤の施用量は使用される化合物の種類、対象雑草、発生傾向、環境条件ならびに使用する剤型等によってかわるが、粉剤及び粒剤のようにそのまま使用する場合は、有効成分として10アール当たり0.1g～5kg、好ましくは1g～1kgの範囲から適宜選ぶのがよい。また、乳剤及び水和剤とする場合のように液状で使用する場合は、0.1～50,000ppm、好ましくは10～10,000ppmの範囲から適宜選ぶのがよい。

また、本発明の化合物は必要に応じて殺虫剤、殺菌剤、他の除草剤、植物生長調節剤、肥料等と混用してもよい。

次に代表的な製剤例をあげて製剤方法を具体的に説明する。化合物、添加剤の種類及び配合比率は、これのみに限定されることなく広い範囲で変更可能である。以下の説明において「部」は重量部を意味する。

〈製剤例 1〉 水和剤

化合物(4)の10部にポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテルの0.5部、 β -ナフタレンスルホン酸ホルマリン縮合物ナトリウム塩の0.5部、珪藻土の20部、クレーの69部を混合粉碎し、水和剤を得る。

〈製剤例 2〉 水和剤

化合物(78)の10部にポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテルの0.5部、 β -ナフタレンスルホン酸ホルマリン縮合物ナトリウム塩の0.5部、珪藻土の20部、ホワイトカーボンの5部、クレーの64部を混合粉碎し、水和剤を得る。

〈製剤例 3〉 水和剤

化合物(201)の10部にポリオキシエチレンオクチルフェニルエーテルの0.5部、 β -ナフタレンスルホン酸ホルマリン縮合物ナトリウム塩の0.5部、珪藻土の20部、ホワイトカーボンの5部、炭酸カルシウムの64部を混合粉碎し、水和剤を得る。

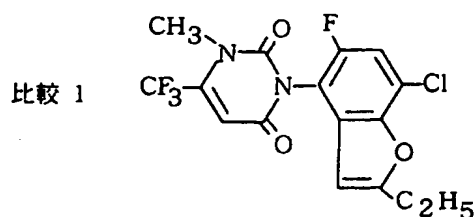
〈製剤例 4〉 乳剤

化合物(8)の30部にキシレンとイソホロンの等量混合物60部、界面活性剤ポリオキシエチレンソルビタンアルキレート、ポリオキシエチレンアルキルアリールポリマー及びアルキルアリールスルホネートの混合物の10部を加え、これらをよくかきまぜることによって乳剤を得る。

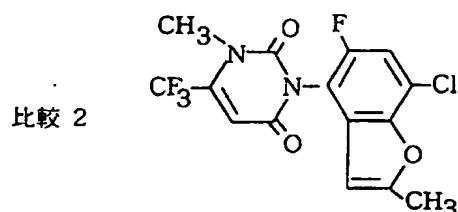
〈製剤例 5〉 粒剤

化合物(44)の10部、タルクとベントナイトを1:3の割合の混合した増量剤の80部、ホワイトカーボンの5部、界面活性剤ポリオキシエチレンソルビタンアルキレート、ポリオキシエチレンアルキルアリールポリマー及びアルキルアリールスルホネートの混合物の5部に水10部を加え、よく練ってペースト状としたものを直径0.7mmのふるい穴から押し出して乾燥した後に0.5~1mmの長さに切断し、粒剤を得る。

次に試験例をあげて本発明化合物の奏する効果を説明する。尚、比較剤として、次に示した化合物を用いた。



特開平5 - 25165号公報明細書記載
(化合物番号 14)



特開平5 - 25165号公報明細書記載
(化合物番号 3)

〈試験例1〉 水田土壌処理による除草効果試験

100 cm²のプラスチックポットに水田土壌を充填し、代掻後、タイヌビエ (Ec)、コナギ (Mo) 及びホタルイ (Sc) の各種子を播種し、水深3 cmに湛水した。翌日、製剤例1に準じて調製した水和剤を水で希釈し、水面滴下した。施用量は、有効成分を10アール当たり100 gとした。その後、温室内で育成し、処理後21日目に表31の基準に従って除草効果を調査した。結果を表32～表40に示す。

(表31)

指数	除草効果（生育抑制程度）及び薬害
5	90%以上の抑制の除草効果、薬害
4	70%以上90%未満の除草効果、薬害
3	50%以上70%未満の除草効果、薬害
2	30%以上50%未満の除草効果、薬害
1	10%以上30%未満の除草効果、薬害
0	0%以上10%未満の除草効果、薬害

(表 3 2)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
1	5	5	5
2	5	5	5
3	5	5	5
4	5	5	5
6	5	5	5
7	5	5	5
8	5	5	5
9	5	5	5
10	5	5	5
12	5	5	5
13	5	5	5
14	5	5	5
15	5	5	5
16	5	5	5
19	5	5	5
20	5	5	5
21	5	5	5
22	5	5	5
23	5	5	5
28	5	5	5
29	5	5	5
30	5	5	5
31	5	5	5
33	5	5	5
35	5	5	5
37	5	5	5
42	5	5	5
43	5	5	5
44	5	5	5

(表 3 3)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
4 5	5	5	5
7 0	5	5	5
7 1	5	5	5
7 2	5	5	5
7 5	5	5	5
7 8	5	5	5
8 3	5	5	5
8 4	5	5	5
9 5	5	5	5
9 8	5	5	5
1 0 1	5	5	5
1 1 1	5	5	5
1 4 0	5	5	5
1 4 1	5	5	5
1 4 2	5	5	5
1 4 3	5	5	5
1 4 7	5	5	5
1 5 2	5	5	5
1 5 3	5	5	5
1 6 5	5	5	5
1 6 6	5	5	5
1 8 7	5	5	4
1 9 5	5	5	5
1 9 6	5	5	5
1 9 7	5	5	5
1 9 8	5	5	5
2 0 0	5	5	5
2 0 1	5	5	5
2 0 2	5	5	5

(表 3 4)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
2 0 7	5	5	5
2 0 8	5	5	5
2 0 9	5	5	5
2 1 0	5	5	5
2 1 3	5	5	5
2 2 2	5	5	5
2 2 8	5	5	5
2 3 3	5	5	5
2 3 0	5	5	5
2 3 9	5	5	5
2 4 5	5	5	5
2 6 5	5	5	5
2 6 6	5	5	5
2 7 2	5	5	5
2 8 9	5	5	5
2 9 9	5	5	5
3 0 3	5	5	5
3 5 0	5	5	5
3 7 4	5	5	5
3 7 5	5	5	5
3 7 9	5	5	5
3 8 3	5	5	5
3 9 2	5	5	5
3 9 3	5	5	5
3 9 4	5	5	5
3 9 7	5	5	5
3 9 8	5	5	5
4 0 0	5	5	5
4 0 1	5	5	5

(表 3 5)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
4 0 2	5	5	5
4 0 4	5	5	5
4 0 5	5	5	5
4 0 6	5	5	5
4 0 7	5	5	5
4 0 9	5	5	5
4 1 0	5	5	5
4 1 1	5	5	5
4 1 2	5	5	5
4 1 7	5	5	5
4 1 8	5	5	5
4 2 1	5	5	5
4 2 3	5	5	5
4 2 4	5	5	5
4 2 7	5	5	5
4 3 2	5	5	5
4 3 3	5	5	5
4 3 5	5	5	5
4 3 6	5	5	5
4 3 9	5	5	5
4 4 0	5	5	5
4 4 1	5	5	5
4 4 2	5	5	5
4 4 3	5	5	5
4 4 4	5	5	5
4 4 5	5	5	5
4 4 6	5	5	5
4 4 7	5	5	5
4 4 8	5	5	5

(表 3 6)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
4 4 9	5	5	5
4 5 0	5	5	5
4 5 1	5	5	5
4 5 2	5	5	5
4 5 3	5	5	5
4 5 4	5	5	5
4 5 5	5	5	5
4 5 6	5	5	5
4 5 7	5	5	5
4 5 8	5	5	5
4 5 9	5	5	5
4 6 0	5	5	5
4 6 1	5	5	5
4 6 2	5	5	5
4 6 3	5	5	5
4 6 4	5	5	5
4 6 6	5	5	4
4 6 7	5	5	5
4 6 8	5	5	5
4 6 9	5	5	5
4 7 0	5	5	5
4 7 1	5	5	5
4 7 2	5	5	5
4 7 3	5	5	5
4 7 6	5	5	5
4 7 9	5	5	5
4 8 2	5	5	5
4 8 3	5	5	5
4 8 4	5	5	5

(表 3 7)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
5 0 8	5	5	5
5 1 0	5	5	5
5 1 1	5	5	5
5 1 3	5	5	5
5 1 5	5	5	5
5 2 1	5	5	5
5 2 4	5	5	5
5 3 9	5	5	5
5 7 1	5	5	5
5 7 2	5	5	5
5 7 7	5	5	5
5 7 8	5	5	5
5 8 4	5	5	5
5 9 1	5	5	5
5 9 2	5	5	5
6 0 5	5	5	5
6 0 6	5	5	5
6 0 7	5	5	5
6 1 0	5	5	5
6 1 2	5	5	5
6 1 7	5	5	5
6 1 8	5	5	5
6 1 9	5	5	5
6 2 2	5	5	5
6 2 3	5	5	5
6 2 4	5	5	5
6 3 0	5	5	5
6 3 1	5	5	5
6 3 4	5	5	5

(表 3 8)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
6 3 5	5	5	5
6 3 6	5	5	5
6 3 9	5	5	5
6 4 0	5	5	5
6 4 1	5	5	5
6 4 2	5	5	4
6 4 3	5	5	5
6 4 4	5	5	5
6 4 5	5	5	5
6 4 6	5	5	5
6 4 7	5	5	5
6 4 8	5	5	5
6 4 9	5	5	5
6 5 0	5	5	5
6 5 1	5	5	5
6 5 3	5	5	4
6 5 5	5	5	5
6 5 6	5	5	5
6 5 7	5	5	5
6 5 8	5	5	5
6 5 9	5	5	5
6 6 0	5	5	5
6 6 1	5	5	5
6 6 2	5	5	5
6 6 3	5	5	5
6 6 4	5	5	5
6 6 5	5	5	5
6 6 6	5	5	5
6 6 7	5	5	5

(表 3 9)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
6 6 8	5	5	5
6 6 9	5	5	5
6 7 0	5	5	5
6 7 1	5	5	5
6 7 2	5	5	5
6 7 4	5	5	5
6 7 6	5	5	5
6 7 7	5	5	5
6 8 0	5	5	5
6 8 1	5	5	5
6 8 2	5	5	5
6 8 4	5	5	5
6 8 5	5	5	5
6 8 6	5	5	5
6 8 8	5	5	5
6 9 8	5	5	5
6 9 9	5	5	5
7 0 0	5	5	5
7 0 1	5	5	5
7 0 2	5	5	5
7 0 3	5	5	5
7 0 4	5	5	4
7 0 5	5	5	5
7 0 6	5	5	5
7 0 7	5	5	5
7 0 8	5	5	5
7 0 9	5	5	5
7 1 0	5	5	5
7 1 1	5	5	5

(表 4 0)

化合物 番 号	除 草 効 果		
	E c	M o	S c
7 1 2	5	5	5
7 2 4	5	5	5
7 2 5	5	5	5
7 2 6	5	5	5
7 2 7	5	5	5

〈試験例 2〉 畑地土壌処理による除草効果試験

120 cm² プラスチックポットに砂を充填し、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、コゴメガヤツリ (C i) の各種子を播種して覆土した。製剤例 1 に準じて調製した水和剤を水で希釈し、10 アール当り有効成分が 100 g になる様に、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理 21 日目に表 31 の基準に従って、除草効果を調査した。その結果を表 41～表 49 に示す。なお、－は未試験を表す。

(表 4 1)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
1	5	5	5	5
2	5	5	5	5
3	5	5	5	5
4	5	5	5	5
6	5	5	5	5
7	5	5	5	5
8	5	5	5	5
9	5	5	5	5
10	5	5	5	5
12	5	5	5	5
13	5	5	5	5
14	5	5	5	5
15	5	5	5	5
16	5	5	5	5
19	5	5	5	5
20	5	5	5	5
21	5	5	5	5
22	5	5	5	5
23	5	5	5	5
25	5	5	5	5
28	5	5	5	5
29	5	5	5	5
30	5	5	5	5
31	5	5	5	5
33	5	5	5	5
35	5	5	5	5
37	5	5	5	5
42	5	5	5	5
43	5	5	5	5

(表 4 2)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 4	5	5	5	5
4 5	5	5	5	5
7 0	5	5	5	5
7 1	5	5	5	5
7 2	5	5	5	5
7 4	5	5	5	5
7 5	5	5	5	5
7 8	5	5	5	5
8 3	5	5	5	5
8 4	5	5	5	5
9 5	5	5	5	5
9 8	5	5	5	5
1 0 1	5	5	5	5
1 1 1	5	5	5	5
1 1 7	5	5	5	5
1 4 0	5	5	5	5
1 4 1	5	5	5	5
1 4 2	5	5	5	5
1 4 3	5	5	5	5
1 4 7	5	5	5	5
1 5 2	5	5	5	5
1 5 3	5	5	5	5
1 6 5	5	5	5	5
1 6 6	5	5	5	5
1 9 5	5	5	5	5
1 9 6	5	5	5	5
1 9 7	5	5	5	5
1 9 8	5	5	5	5
2 0 0	5	5	5	5

(表 4 3)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
2 0 1	5	5	5	5
2 0 2	5	5	5	5
2 0 6	5	5	5	5
2 0 7	5	5	5	5
2 0 8	5	5	5	5
2 0 9	5	5	5	5
2 1 0	5	5	5	5
2 1 3	5	5	5	5
2 1 9	5	5	5	5
2 2 2	5	5	5	5
2 2 7	5	5	5	5
2 2 8	5	5	5	5
2 3 0	5	5	5	5
2 3 1	5	5	5	5
2 3 3	5	5	5	5
2 3 8	5	5	5	5
2 3 9	5	5	5	5
2 4 0	5	5	5	5
2 4 1	5	5	5	5
2 4 5	5	5	5	5
2 4 6	5	5	5	5
2 4 7	5	5	5	5
2 4 8	5	5	5	5
2 6 5	5	5	5	5
2 6 6	5	5	5	5
2 6 7	5	5	5	5
2 6 9	5	5	5	5
2 7 0	5	5	5	5
2 7 2	5	5	5	5

(表 4 4)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
2 8 9	5	5	5	5
2 9 9	5	5	5	5
3 0 1	5	5	5	5
3 0 3	5	5	5	5
3 0 5	5	5	5	5
3 4 9	5	5	5	5
3 5 0	5	5	5	5
3 7 4	5	5	5	5
3 7 5	5	5	5	5
3 7 9	5	5	5	5
3 8 3	5	5	5	5
3 9 2	5	5	5	5
3 9 3	5	5	5	5
3 9 4	5	5	5	5
3 9 7	5	5	5	5
3 9 8	5	5	5	5
4 0 0	5	5	5	5
4 0 1	5	5	5	5
4 0 2	5	5	5	5
4 0 4	5	5	5	5
4 0 5	5	5	5	5
4 0 6	5	5	5	5
4 0 7	5	5	5	5
4 0 9	5	5	5	5
4 1 0	5	5	5	5
4 1 1	5	5	5	5
4 1 2	5	5	5	5
4 1 7	5	5	5	5
4 1 8	5	5	5	5

(表 4 5)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 2 1	5	5	5	5
4 2 3	5	5	5	5
4 2 4	5	5	5	5
4 2 7	5	5	5	5
4 3 2	5	5	5	5
4 3 3	5	5	5	5
4 3 5	5	5	5	5
4 3 6	5	5	5	5
4 3 9	5	5	5	—
4 4 0	5	5	5	5
4 4 1	5	5	5	—
4 4 2	5	5	5	5
4 4 3	5	5	5	5
4 4 4	5	5	5	5
4 4 5	5	5	5	5
4 4 6	5	5	5	5
4 4 7	5	5	5	5
4 4 8	5	5	5	5
4 4 9	5	5	5	5
4 5 0	5	5	5	5
4 5 2	5	5	5	—
4 5 3	5	5	5	5
4 5 4	5	5	5	5
4 5 5	5	5	5	5
4 5 6	5	5	5	5
4 5 7	5	5	5	5
4 5 8	5	5	5	5
4 5 9	5	5	5	5
4 6 0	5	5	5	5

(表 4 6)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 6 1	5	5	5	5
4 6 2	5	5	5	5
4 6 3	5	5	5	5
4 6 4	5	5	5	5
4 6 6	5	5	5	5
4 6 7	5	5	5	5
4 6 8	5	5	5	5
4 6 9	5	5	5	5
4 7 0	5	5	5	—
4 7 1	5	5	5	5
4 7 2	5	5	5	—
4 7 3	5	5	5	5
4 8 2	5	5	5	5
4 8 3	5	5	5	5
4 8 4	5	5	5	5
5 0 8	5	5	5	5
5 1 0	5	5	5	5
5 1 1	5	5	5	5
5 1 3	5	5	5	5
5 1 5	5	5	5	5
5 2 1	5	5	5	5
5 2 4	5	5	5	5
5 3 9	5	5	5	5
5 7 1	5	5	5	5
5 7 2	5	5	5	5
5 7 7	5	5	5	5
5 7 8	5	5	5	5
5 8 4	5	5	5	5
5 9 1	5	5	5	5

(表 4 7)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
5 9 2	5	5	5	5
6 0 5	5	5	5	5
6 0 6	5	5	5	5
6 0 7	5	5	5	5
6 1 0	5	5	5	5
6 1 2	5	5	5	5
6 1 7	5	5	5	5
6 1 8	5	5	5	5
6 1 9	5	5	5	5
6 2 2	5	5	5	5
6 2 3	5	5	5	5
6 2 4	5	5	5	5
6 3 0	5	5	5	5
6 3 1	5	5	5	5
6 3 2	5	5	5	5
6 3 4	5	5	5	5
6 3 5	5	5	5	5
6 3 6	5	5	5	5
6 3 9	5	5	5	5
6 4 0	5	5	5	5
6 4 3	5	5	5	5
6 4 4	4	5	5	5
6 4 5	5	5	5	5
6 4 6	5	5	5	5
6 4 7	5	5	5	5
6 4 8	5	5	5	5
6 4 9	5	5	5	5
6 5 1	5	5	5	5
6 5 2	5	5	5	5

(表 4 8)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
6 5 3	5	5	5	5
6 5 5	5	5	5	5
6 5 6	5	5	5	5
6 5 7	5	5	5	5
6 5 8	5	5	5	5
6 5 9	5	5	5	—
6 6 0	5	5	5	5
6 6 1	5	5	5	5
6 6 2	5	5	5	5
6 6 3	5	5	5	5
6 6 4	5	5	5	5
6 6 5	5	5	5	5
6 6 6	5	5	5	5
6 6 7	5	5	5	5
6 6 8	5	5	5	5
6 6 9	5	5	5	5
6 7 0	5	5	5	5
6 7 1	5	5	5	5
6 7 2	5	5	5	5
6 7 3	5	5	5	5
6 7 4	5	5	5	5
6 7 5	5	5	5	5
6 7 6	5	5	5	5
6 7 7	5	5	5	5
6 8 0	5	5	5	5
6 8 1	5	5	5	5
6 8 2	5	5	5	5
6 8 4	5	5	5	5
6 8 5	5	5	5	5

(表 4 9)

化合物 番 号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
6 8 6	5	5	5	5
6 8 8	5	5	5	5
6 9 8	5	5	5	—
6 9 9	5	5	5	—
7 0 0	5	5	5	—
7 0 1	5	5	5	5
7 0 2	5	5	5	—
7 0 3	5	5	5	—
7 0 4	5	5	5	—
7 0 5	5	5	5	5
7 0 6	5	5	5	5
7 0 7	5	5	5	5
7 0 8	5	5	5	5
7 0 9	5	5	5	5
7 1 0	5	5	5	5
7 1 1	5	5	5	5
7 1 2	5	5	5	5
7 2 4	5	5	5	5
7 2 5	5	5	5	5
7 2 6	5	5	5	5
7 2 7	5	5	5	5
7 3 0	5	5	5	5

〈試験例3〉 畑地茎葉処理による除草効果試験

120 cm² プラスチックポットに砂を充填し、オオイヌタデ (Po)、アオビユ (Am)、シロザ (Ch)、コゴメガヤツリ (Ci) の各種子を播種し、温室内で2週間育成後、製剤例1に準じて調製した水和剤を水に希釈し、10アール当り有効成分が100 gになる様に、10アール当り100 lを小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理14日目に表31の基準に従って、除草効果を調査した。その結果を表50～表58に示す。

(表 5 0)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
1	5	5	5	5
2	5	5	5	5
3	5	5	5	5
4	5	5	5	5
6	5	5	5	5
7	5	5	5	5
8	5	5	5	5
9	5	5	5	5
10	5	5	5	5
12	5	5	5	5
13	5	5	5	5
14	5	5	5	5
15	5	5	5	5
16	5	5	5	5
19	5	5	5	5
20	5	5	5	5
21	5	5	5	5
22	5	5	5	5
23	5	5	5	5
25	5	5	5	5
28	5	5	5	5
29	5	5	5	5
30	5	5	5	5
31	5	5	5	5
33	5	5	5	5
35	5	5	5	5
37	5	5	5	5
42	5	5	5	5
43	5	5	5	5

(表 5 1)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 4	5	5	5	5
4 5	5	5	5	5
7 0	5	5	5	5
7 1	5	5	5	5
7 2	5	5	5	5
7 4	5	5	5	5
7 5	5	5	5	5
7 8	5	5	5	5
8 3	5	5	5	5
8 4	5	5	5	5
9 5	5	5	5	5
9 8	5	5	5	5
1 0 1	5	5	5	5
1 1 1	5	5	5	5
1 1 6	5	5	5	5
1 4 0	5	5	5	5
1 4 1	5	5	5	5
1 4 2	5	5	5	5
1 4 3	5	5	5	5
1 4 7	5	5	5	5
1 5 2	5	5	5	5
1 5 3	5	5	5	5
1 6 5	5	5	5	5
1 6 6	5	5	5	5
1 9 5	5	5	5	5
1 9 6	5	5	5	5
1 9 7	5	5	5	5
1 9 8	5	5	5	5
2 0 0	5	5	5	5

(表 5 2)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
2 0 1	5	5	5	5
2 0 2	5	5	5	5
2 0 6	5	5	5	5
2 0 7	5	5	5	5
2 0 8	5	5	5	5
2 0 9	5	5	5	5
2 1 0	5	5	5	5
2 1 3	5	5	5	5
2 1 9	5	5	5	5
2 2 2	5	5	5	5
2 2 7	5	5	5	5
2 2 8	5	5	5	5
2 3 0	5	5	5	5
2 3 1	5	5	5	5
2 3 3	5	5	5	5
2 3 8	5	5	5	5
2 3 9	5	5	5	5
2 4 0	5	5	5	5
2 4 1	5	5	5	5
2 4 5	5	5	5	5
2 4 6	5	5	5	5
2 4 7	5	5	5	5
2 4 8	5	5	5	5
2 6 5	5	5	5	5
2 6 6	5	5	5	5
2 6 7	5	5	5	5
2 6 9	5	5	5	5
2 7 2	5	5	5	5
2 8 9	5	5	5	5

(表 5 3)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
2 9 9	5	5	5	5
3 0 1	5	5	5	5
3 0 3	5	5	5	5
3 0 5	5	5	5	5
3 4 9	5	5	5	5
3 5 0	5	5	5	5
3 7 4	5	5	5	5
3 7 5	5	5	5	5
3 7 9	5	5	5	5
3 8 3	5	5	5	5
3 9 2	5	5	5	5
3 9 3	5	5	5	5
3 9 4	5	5	5	5
3 9 7	5	5	5	5
3 9 8	5	5	5	5
4 0 0	5	5	5	5
4 0 1	5	5	5	5
4 0 2	5	5	5	5
4 0 4	5	5	5	5
4 0 5	5	5	5	5
4 0 6	5	5	5	5
4 0 7	5	5	5	5
4 0 9	5	5	5	5
4 1 0	5	5	5	5
4 1 1	5	5	5	5
4 1 2	5	5	5	5
4 1 7	5	5	5	5
4 1 8	5	5	5	5
4 2 1	5	5	5	5

(表 5 4)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 2 3	5	5	5	5
4 2 4	5	5	5	5
4 2 7	5	5	5	5
4 3 2	5	5	5	5
4 3 3	5	5	5	5
4 3 5	5	5	5	5
4 3 6	5	5	5	5
4 3 9	5	5	5	5
4 4 0	5	5	5	5
4 4 1	5	5	5	5
4 4 2	5	5	5	5
4 4 3	5	5	5	5
4 4 4	5	5	5	5
4 4 5	5	5	5	5
4 4 6	5	5	5	5
4 4 7	5	5	5	5
4 4 8	5	5	5	5
4 4 9	5	5	5	5
4 5 0	5	5	5	5
4 5 1	5	5	5	5
4 5 2	5	5	5	5
4 5 3	5	5	5	5
4 5 4	5	5	5	5
4 5 5	5	5	5	5
4 5 6	5	5	5	5
4 5 7	5	5	5	5
4 5 8	5	5	5	5
4 5 9	5	5	5	5
4 6 0	5	5	5	5

(表 5 5)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
4 6 1	5	5	5	5
4 6 2	5	5	5	5
4 6 3	5	5	5	5
4 6 4	5	5	5	5
4 6 6	5	5	5	5
4 6 7	5	5	5	5
4 6 8	5	5	5	5
4 6 9	5	5	5	5
4 7 0	5	5	5	5
4 7 1	5	5	5	5
4 7 2	5	5	5	5
4 7 3	5	5	5	5
4 7 6	5	5	5	5
4 7 9	5	5	5	5
4 8 2	5	5	5	5
4 8 3	5	5	5	5
4 8 4	5	5	5	5
5 0 8	5	5	5	5
5 1 0	5	5	5	5
5 1 1	5	5	5	5
5 1 3	5	5	5	5
5 1 5	5	5	5	5
5 2 1	5	5	5	5
5 2 4	5	5	5	5
5 3 9	5	5	5	5
5 7 1	5	5	5	5
5 7 2	5	5	5	5
5 7 7	5	5	5	5
5 7 8	5	5	5	5

(表 5 6)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
5 8 4	5	5	5	5
5 9 1	5	5	5	5
5 9 2	5	5	5	5
6 0 5	5	5	5	5
6 0 6	5	5	5	5
6 0 7	5	5	5	5
6 1 0	5	5	5	5
6 1 2	5	5	5	5
6 1 7	5	5	5	5
6 1 8	5	5	5	5
6 1 9	5	5	5	5
6 2 2	5	5	5	5
6 2 3	5	5	5	5
6 2 4	5	5	5	5
6 3 0	5	5	5	5
6 3 1	5	5	5	5
6 3 2	5	5	5	5
6 3 4	5	5	5	5
6 3 5	5	5	5	5
6 3 6	5	5	5	5
6 3 9	5	5	5	5
6 4 0	5	5	5	5
6 4 1	5	5	5	5
6 4 3	5	5	5	5
6 4 4	5	5	5	5
6 4 5	5	5	5	5
6 4 6	5	5	5	5
6 4 7	5	5	5	5
6 4 8	5	5	5	5

5 (表 57)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
649	5	5	5	5
651	5	5	5	5
653	5	5	5	5
655	5	5	5	5
656	5	5	5	5
657	5	5	5	5
658	5	5	5	5
659	5	5	5	5
660	5	5	5	5
661	5	5	5	5
662	5	5	5	5
663	5	5	5	5
664	5	5	5	5
665	5	5	5	5
666	5	5	5	5
667	5	5	5	5
668	5	5	5	5
669	5	5	5	5
670	5	5	5	5
671	5	5	5	5
672	5	5	5	5
674	5	5	5	5
676	5	5	5	5
677	5	5	5	5
680	5	5	5	5
681	5	5	5	5
682	5	5	5	5
684	5	5	5	5
685	5	5	5	5

(表 5 8)

化合物番号	除 草 効 果			
	P o	A m	C h	C i
6 8 6	5	5	5	5
6 8 8	5	5	5	5
6 9 8	5	5	5	5
6 9 9	5	5	5	5
7 0 1	5	5	5	5
7 0 2	5	5	5	5
7 0 3	5	5	5	5
7 0 4	5	5	5	5
7 0 5	5	5	5	5
7 0 6	5	5	5	5
7 0 7	5	5	5	5
7 0 8	5	5	5	5
7 0 9	5	5	5	5
7 1 0	5	5	5	5
7 1 1	5	5	5	5
7 1 2	5	5	5	5
7 2 4	5	5	5	5
7 2 5	5	5	5	5
7 2 6	5	5	5	5
7 2 7	5	5	5	5
7 3 0	5	5	5	5

〈試験例4〉 畑地土壌処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、コムギ (Tr)、オオイヌタデ (Po)、アオビユ (Am)、シロザ (Ch)、イチビ (Ab) の各種子を播種して覆土した。翌日、製剤例1に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g/10 a) を水で希釈し、10アール当り100 lを小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理後21日目に表31の基準に従って除草効果及び薬害を調査した。試験結果を表59～表62に示す。なお、－は未試験を表す。

(表 5 9)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	T r
3	1. 6	5	5	5	5	0
6	1. 6	5	5	5	5	1
8	1. 6	5	5	5	5	1
1 3	1. 6	5	5	5	5	0
1 5	1. 6	5	5	5	5	0
2 2	1. 6	5	5	5	5	0
2 3	1. 6	5	5	5	5	1
3 1	1. 6	5	5	5	5	1
3 3	1. 6	5	5	5	5	1
7 0	1. 6	5	5	5	5	1
7 1	1. 6	5	5	5	5	1
7 2	1. 6	5	5	5	5	0
7 8	1. 6	5	5	5	5	1
8 4	6. 3	5	5	5	5	1
9 5	1. 6	5	5	5	5	1
9 8	6. 3	5	5	5	5	1
1 1 1	1. 6	5	5	5	5	1
1 4 2	6. 3	5	5	5	5	1
1 5 2	1. 6	5	5	4	5	0
1 5 3	6. 3	5	5	5	5	1
1 6 5	1. 6	5	5	5	5	1
2 0 0	1. 6	5	5	5	5	1
2 2 2	1. 6	5	5	5	5	0
2 3 3	1. 6	5	5	5	5	1
2 4 5	6. 3	5	5	5	5	0
2 4 6	1. 6	5	5	5	5	0
2 4 7	6. 3	5	5	5	5	0
2 6 6	6. 3	5	5	5	5	1
2 8 9	1. 6	5	5	5	5	1

(表 60)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 10 a	P o	A m	C h	A b	T r
374	1.6	5	5	5	5	1
379	1.6	5	5	5	5	1
383	1.6	5	5	5	5	1
392	1.6	5	5	4	5	1
394	1.6	5	5	5	5	1
397	1.6	5	5	5	5	1
398	1.6	5	5	5	4	1
402	6.3	5	5	5	5	1
406	1.6	5	5	5	5	1
407	1.6	5	5	5	5	1
409	1.6	5	5	5	5	1
410	1.6	5	5	5	5	1
411	1.6	5	5	5	5	1
417	1.6	5	5	5	5	1
421	1.6	5	5	5	5	1
423	1.6	5	5	5	5	1
432	1.6	5	5	5	5	1
435	6.3	5	5	5	5	1
436	1.6	5	5	5	5	1
439	1.6	5	5	5	5	1
440	1.6	5	5	5	5	1
441	1.6	5	5	5	5	1
444	6.3	5	5	5	5	1
447	6.3	5	5	5	5	1
448	6.3	5	5	5	5	1
454	1.6	5	5	5	5	1
458	1.6	5	5	5	5	0
459	1.6	5	5	5	5	1
462	1.6	5	5	5	5	1

(表 6 1)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害 T r
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	
4 6 7	1. 6	5	5	5	5	1
4 6 8	6. 3	5	5	5	5	1
4 7 1	1. 6	5	5	5	5	1
4 8 2	1. 6	5	5	5	—	1
5 1 5	1. 6	5	5	5	5	1
5 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
5 3 9	1. 6	5	5	5	5	1
5 7 8	1. 6	5	5	5	5	0
6 1 7	1. 6	5	5	5	5	1
6 1 9	1. 6	5	5	5	5	1
6 3 0	6. 3	4	5	5	5	1
6 3 9	1. 6	5	5	5	5	0
6 4 8	1. 6	5	5	5	5	1
6 5 6	1. 6	5	5	5	5	1
6 5 8	1. 6	5	5	5	5	0
6 6 1	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 2	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 5	1. 6	5	4	5	4	1
6 6 7	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 8	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 9	1. 6	5	5	5	5	1
6 7 2	6. 3	5	5	5	5	1
6 7 7	6. 3	5	5	—	5	1
6 8 2	1. 6	5	5	5	5	1
6 9 9	6. 3	5	5	5	4	1
7 0 2	6. 3	5	5	5	5	1
7 0 5	1. 6	5	5	—	5	1
7 0 8	1. 6	5	5	5	5	0
7 2 4	1. 6	5	5	5	5	1

(表 6 2)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i. g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	T r
比較 1	1. 6	5	5	5	5	5
比較 2	1. 6	5	5	5	5	5

〈試験例 5〉 畑地土壌処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、ダイズ (G l)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種して覆土した。翌日、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i. g / 1 0 a) を水で希釈し、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理後 21 日目に表 31 の基準に従って除草効果及び薬害を調査した。試験結果を表 6 3～表 6 4 に示す。なお、－は未試験を表す。

(表 6 3)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	G l
4	1. 6	5	5	5	5	1
6	1. 6	5	5	5	5	1
7	1. 6	5	5	5	4	0
3 1	1. 6	5	5	5	5	1
7 0	1. 6	5	5	5	5	0
7 1	1. 6	5	5	5	5	1
7 2	1. 6	5	5	5	5	0
1 5 2	1. 6	5	5	4	5	1
2 0 1	6. 3	5	5	5	5	0
2 0 7	1. 6	5	5	5	5	1
2 3 3	6. 3	5	5	5	5	1
2 3 9	6. 3	5	5	5	5	1
2 6 6	6. 3	5	5	5	5	0
3 9 7	1. 6	5	5	5	5	1
3 9 8	1. 6	5	5	5	4	1
4 2 1	1. 6	5	5	5	5	1
4 3 5	6. 3	5	5	5	5	1
4 3 6	1. 6	5	5	5	5	1
4 3 9	1. 6	5	5	5	5	1
4 4 1	1. 6	5	5	5	5	1
4 4 7	6. 3	5	5	5	5	1
4 5 0	6. 3	5	5	5	5	1
4 5 8	1. 6	5	5	5	5	0
4 5 9	1. 6	5	5	5	5	1
4 6 3	6. 3	5	5	5	5	1
6 1 8	1. 6	5	5	5	5	0
6 3 0	6. 3	4	5	5	5	1
6 3 9	1. 6	5	5	5	5	1
6 5 5	6. 3	5	5	5	5	1

(表 6 4)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	G l
6 5 6	1. 6	5	5	5	5	0
6 5 8	1. 6	5	5	5	5	0
6 6 1	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 2	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 5	1. 6	5	4	5	4	0
6 6 7	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 8	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 9	1. 6	5	5	5	5	0
6 8 0	1. 6	5	5	—	4	1
7 0 2	6. 3	5	5	5	5	1
7 0 7	1. 6	5	5	5	5	1
7 0 8	1. 6	5	5	5	5	0
7 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
比較 1	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5
比較 2	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5

〈試験例 6〉 畑地土壌処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、トウモロコシ (Z e)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種して覆土した。翌日、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 1 0 a) を水で希釈し、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理後 21 日目に表 31 の基準に従って除草効果及び薬害を調査した。試験結果を表 6 5 ~ 表 6 6 に示す。なお、— は未試験を表す。

(表 6 5)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 10 a	P o	A m	C h	A b	Z e
3	1. 6	5	5	5	5	0
6	1. 6	5	5	5	5	0
7	1. 6	5	5	5	4	0
4 3	1. 6	5	5	5	5	0
7 0	1. 6	5	5	5	5	0
7 2	1. 6	5	5	5	5	0
1 5 2	1. 6	5	5	4	5	1
2 3 9	6. 3	5	5	5	5	1
2 4 6	1. 6	5	5	5	5	0
2 6 6	6. 3	5	5	5	5	0
3 7 4	1. 6	5	5	5	5	1
3 9 7	1. 6	5	5	5	5	1
4 0 6	1. 6	5	5	5	5	1
4 3 2	1. 6	5	5	5	5	1
4 4 1	1. 6	5	5	5	5	1
4 5 4	1. 6	5	5	5	5	1
4 5 8	1. 6	5	5	5	5	1
5 1 5	1. 6	5	5	5	5	1
5 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
6 1 8	1. 6	5	5	5	5	1
6 3 0	6. 3	4	5	5	5	1
6 5 8	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 1	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 5	1. 6	5	4	5	4	1
6 9 9	6. 3	5	5	5	4	1
7 0 5	1. 6	5	5	—	5	1
7 0 8	1. 6	5	5	5	5	0
比較 1	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5

(表 6 6)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	Z e
比較 2	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5

〈試験例 7〉 畑地土壌処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、ワタ (G o)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種して覆土した。翌日、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 1 0 a) を水で希釈し、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理後 21 日目に表 3 1 の基準に従って除草効果及び薬害を調査した。試験結果を表 6 7 ~ 表 6 9 に示す。なお、- は未試験を表す。

(表 6 7)

化合物	薬 量	除 草 効 果				薬害
番 号	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	G o
3	1. 6	5	5	5	5	0
7	1. 6	5	5	5	4	0
10	1. 6	5	5	5	5	1
15	1. 6	5	5	5	5	1
30	1. 6	5	5	5	5	0
31	1. 6	5	5	5	5	0
33	1. 6	5	5	5	5	1
43	1. 6	5	5	5	5	1
70	1. 6	5	5	5	5	0
71	1. 6	5	5	5	5	0
72	1. 6	5	5	5	5	1
111	1. 6	5	5	5	5	1
147	1. 6	5	5	5	5	1
152	1. 6	5	5	4	5	0
153	6. 3	5	5	5	5	0
166	6. 3	5	5	5	5	1
197	1. 6	5	5	5	5	0
201	1. 6	5	5	5	4	0
233	1. 6	5	5	5	5	1
237	6. 3	5	5	5	5	1
266	6. 3	5	5	5	5	1
272	6. 3	5	5	5	5	1
299	1. 6	5	5	5	5	1
374	1. 6	5	5	5	5	1
383	1. 6	5	5	5	5	1
397	1. 6	5	5	5	5	0
398	1. 6	5	5	5	4	1
405	1. 6	5	5	5	5	1
406	1. 6	5	5	5	5	1

(表 68)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i. g / 10 a	P o	A m	C h	A b	G o
410	1. 6	5	5	5	5	1
411	1. 6	5	5	5	5	0
417	1. 6	5	5	5	5	0
418	1. 6	5	5	5	5	1
421	1. 6	5	5	5	5	1
424	1. 6	5	—	5	5	1
432	1. 6	5	5	5	5	0
435	6. 3	5	5	5	5	1
436	1. 6	5	5	5	5	0
442	6. 3	5	5	5	5	1
444	6. 3	5	5	5	5	1
448	6. 3	5	5	5	5	1
454	1. 6	5	5	5	5	1
458	1. 6	5	5	5	5	0
459	1. 6	5	5	5	5	1
463	6. 3	5	5	5	5	0
468	6. 3	5	5	5	5	1
471	1. 6	5	5	5	5	1
515	1. 6	5	5	5	5	1
571	6. 3	4	5	5	5	1
577	1. 6	5	4	5	5	1
578	1. 6	5	5	5	5	1
618	1. 6	5	5	5	5	0
630	6. 3	4	5	5	5	1
631	6. 3	5	5	5	5	1
639	1. 6	5	5	5	5	0
655	6. 3	5	5	5	5	0
656	1. 6	5	5	5	5	0
658	1. 6	5	5	5	5	0

(表 6 9)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	G o
6 6 1	1. 6	5	5	5	5	0
6 6 5	1. 6	5	4	5	4	0
6 6 6	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 7	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 8	1. 6	5	5	5	5	0
6 6 9	1. 6	5	5	5	5	1
6 7 2	6. 3	5	5	5	5	1
6 8 0	1. 6	5	5	—	4	1
6 9 9	6. 3	5	5	5	4	1
7 0 2	6. 3	5	5	5	5	1
7 0 5	1. 6	5	5	—	5	1
7 0 6	1. 6	5	5	5	5	1
7 0 7	1. 6	5	5	5	5	1
7 0 8	1. 6	5	5	5	5	0
7 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
比較 1	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5
比較 2	6. 3	5	5	5	5	5
	1. 6	5	5	5	5	5

〈試験例 8〉 畑地茎葉処理による作物選択性試験

6 0 0 c m² プラスチックポットに砂を充填し、イネ (O r)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種し、温室内で 2 週間育成後、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 1 0 a) を水で希釈し、1 0 アール当り 1 0 0 l を小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理 1 4 日目に表 3 1 の基準に従って、除草効果及び薬害を調査した。その結果を表 7 0 に示す。

(表 7 0)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	O r
6	1. 6	5	5	5	5	1
1 0	1. 6	5	5	5	5	1
1 2	0. 4	5	5	5	5	1
3 3	1. 6	5	5	5	5	1
4 4	0. 4	4	5	5	5	0
7 2	1. 6	5	5	5	5	1
7 8	0. 4	5	5	5	5	1
1 1 1	0. 4	5	5	5	5	1
2 0 7	0. 4	5	5	5	5	1
2 2 8	1. 6	5	5	5	5	1
比較 1	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	3
比較 2	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	4

〈試験例 9〉 畑地茎葉処理による作物選択性試験

6 0 0 c m² プラスチックポットに砂を充填し、コムギ (T r)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種し、温室内で 2 週間育成後、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 1 0 a) を水で希釈し、1 0 アール当たり 1 0 0 l を小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理 1 4 日目に表 3 1 の基準に従って、除草効果及び薬害を調査した。その結果を表 7 1 ~ 表 7 3 に示す。

(表 7 1)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	T r
1	0. 4	5	5	5	5	1
3	0. 4	5	5	5	5	1
4	1. 6	5	5	5	5	1
1 0	1. 6	5	5	5	5	1
1 2	0. 4	5	5	5	5	0
1 4	0. 4	5	5	5	5	1
2 2	0. 4	5	5	5	5	0
3 0	1. 6	5	5	5	5	1
3 3	1. 6	5	5	5	5	1
3 5	1. 6	5	5	5	5	0
4 3	1. 6	5	5	5	5	0
4 5	1. 6	5	5	5	5	1
7 0	1. 6	5	5	5	5	1
7 4	1. 6	5	5	5	5	1
8 3	1. 6	4	5	5	4	1
9 5	1. 6	5	5	5	5	1
9 8	0. 4	4	5	5	5	1
1 0 1	0. 4	5	5	5	5	1
1 1 1	0. 4	5	5	5	5	1
1 4 3	0. 4	5	5	5	5	1
1 5 2	0. 4	5	5	5	5	0
1 5 3	0. 4	5	5	5	5	1
2 0 7	0. 4	5	5	5	5	1
2 2 2	0. 4	5	5	5	5	1
2 7 2	1. 6	5	5	5	5	1
3 9 4	0. 4	5	5	5	5	0
4 0 2	0. 4	4	5	5	5	1
4 0 5	0. 4	5	5	5	5	1
4 1 1	1. 6	4	5	5	5	1

(表 7 2)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i. g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	T r
4 2 3	1. 6	5	5	5	5	1
4 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
4 3 2	0. 4	5	5	5	5	1
4 3 6	1. 6	5	5	5	5	1
4 3 9	0. 4	5	5	4	5	1
4 4 7	1. 6	5	5	4	5	1
4 5 8	0. 4	5	5	5	5	1
4 6 0	1. 6	4	5	4	5	1
4 6 2	0. 4	5	5	5	5	1
4 6 3	0. 4	5	5	5	4	1
4 6 4	0. 4	5	5	5	5	1
4 6 7	1. 6	5	5	5	5	1
4 6 8	0. 4	4	5	5	4	1
4 6 9	0. 4	5	5	5	5	1
4 8 2	0. 4	5	5	5	5	1
5 1 5	0. 4	5	5	4	5	1
5 7 1	0. 4	4	5	5	5	1
5 7 2	1. 6	5	5	5	5	1
5 8 4	0. 4	5	5	5	5	1
5 9 1	0. 4	5	5	5	5	1
5 9 2	0. 4	5	5	5	5	1
6 0 5	1. 6	4	5	5	5	1
6 0 6	0. 4	5	5	4	5	1
6 0 7	0. 4	5	5	4	5	1
6 3 0	1. 6	5	5	5	5	1
6 3 4	0. 4	5	5	5	5	1
6 3 5	1. 6	5	5	5	5	1
6 4 3	1. 6	5	5	5	4	1
6 5 8	1. 6	5	5	5	5	1

(表 7 3)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	T r
6 6 9	1. 6	4	5	5	5	1
6 7 0	1. 6	5	5	5	5	1
6 7 1	1. 6	5	5	5	5	1
6 8 8	0. 4	4	5	5	5	1
7 0 6	1. 6	4	5	5	5	1
7 0 7	0. 4	5	5	5	5	0
7 0 8	0. 4	5	5	5	5	1
7 1 2	0. 4	5	5	5	5	1
比較 1	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	3
比較 2	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	3

〈試験例 1 0〉 畑地茎葉処理による作物選択性試験

6 0 0 c m² プラスチックポットに砂を充填し、トウモロコシ (Z e)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種し、温室内で2週間育成後、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 1 0 a) を水で希釈し、1 0 アール当り 1 0 0 l を小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理 1 4 日目に表 3 1 の基準に従って、除草効果及び薬害を調査した。その結果を表 7 4 ~ 表 7 5 に示す。

(表 7 4)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i. g / 10 a	P o	A m	C h	A b	Z e
4	0. 4	5	5	5	4	1
6	1. 6	5	5	5	5	1
7	1. 6	5	5	5	5	1
22	0. 4	5	5	5	5	0
70	1. 6	5	5	5	5	1
72	1. 6	5	5	5	5	1
74	1. 6	5	5	5	5	0
78	0. 4	5	5	5	5	0
83	1. 6	4	5	5	4	1
95	1. 6	5	5	5	5	1
101	0. 4	5	5	5	5	1
111	0. 4	5	5	5	5	1
140	1. 6	5	5	5	5	1
142	0. 4	5	5	5	5	1
152	0. 4	5	5	5	5	1
195	1. 6	4	5	5	5	1
207	0. 4	5	5	5	5	1
222	0. 4	5	5	5	5	0
228	1. 6	5	5	5	5	0
265	1. 6	5	5	5	5	1
272	1. 6	5	5	5	5	0
394	0. 4	5	5	5	5	1
411	1. 6	4	5	5	5	1
423	1. 6	5	5	5	5	1
435	0. 4	5	5	5	5	1
463	0. 4	5	5	5	4	1
464	0. 4	5	5	5	5	1
468	0. 4	4	5	5	4	1
482	0. 4	5	5	5	5	1

(表 7 5)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	Z e
5 1 5	0. 4	5	5	4	5	1
5 7 7	0. 4	5	5	4	5	1
5 7 8	0. 4	5	5	5	4	1
5 8 4	0. 4	5	5	5	5	1
6 0 6	0. 4	5	5	4	5	1
6 0 7	0. 4	5	5	4	5	1
6 1 7	1. 6	5	5	5	5	1
6 2 3	0. 4	5	5	5	5	1
6 3 4	0. 4	5	5	5	5	1
6 3 5	1. 6	5	5	5	5	1
6 4 7	0. 4	5	5	5	5	1
6 6 2	0. 4	5	5	5	5	1
6 6 3	0. 4	5	5	5	5	1
6 6 6	1. 6	5	5	5	5	1
6 6 9	1. 6	4	5	5	5	1
6 7 1	1. 6	5	5	5	5	1
6 8 2	1. 6	5	5	5	5	1
6 8 8	0. 4	4	5	5	5	1
7 0 6	1. 6	4	5	5	5	1
7 0 7	0. 4	5	5	5	5	1
7 0 8	0. 4	5	5	5	5	1
7 1 2	0. 4	5	5	5	5	1
7 2 4	1. 6	5	5	5	5	1
7 2 5	1. 6	5	5	5	5	1
比較 1	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	4
比較 2	1. 6	5	5	5	5	5
	0. 4	5	5	5	5	3

〈試験例 1 1〉 畑地茎葉処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、ダイズ (G l)、アオビユ (A m)、イチビ (A b) の各種子を播種し、温室内で2週間育成後、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 10 a) を水で希釈し、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で植物体の上方から全体に茎葉散布処理した。その後、温室内で育成し、処理 14 日目に表 31 の基準に従って、除草効果及び薬害を調査した。その結果を表 76 に示す。

(表 76)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果		薬害
	a i, g / 10 a	A m	A b	G l
7	1. 6	5	5	1
8	1. 6	5	5	1
74	1. 6	5	5	0
463	0. 4	5	4	1
464	0. 4	5	5	1
468	0. 4	5	4	1
635	0. 4	5	5	1
669	0. 4	4	5	1
686	0. 4	5	5	1
701	1. 6	5	4	1
726	0. 4	5	5	1
比較 1	1. 6	5	5	5
	0. 4	5	5	5
比較 2	1. 6	5	5	5
	0. 4	5	5	5

〈試験例 12〉 畑地茎葉処理による作物選択性試験

600 cm² プラスチックポットに砂を充填し、ワタ (G o)、オオイヌタデ (P o)、アオビユ (A m)、シロザ (C h)、イチビ (A b) の各種子を播種して覆土した。翌日、製剤例 1 に準じて調製した水和剤の所定有効成分量 (a i, g / 10 a) を水で希釈し、10 アール当り 100 l を小型噴霧器で土壌表面に均一に散布した。その後、温室内で育成し、処理後 21 日目に表 31 の

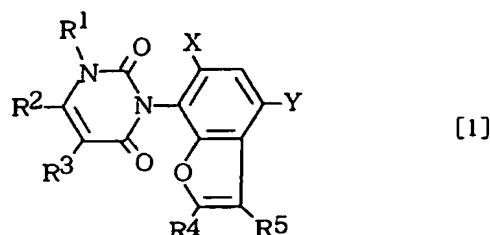
基準に従って除草効果及び薬害を調査した。試験結果を表 7 7 に示す。

(表 7 7)

化合物 番 号	薬 量	除 草 効 果				薬害
	a i, g / 1 0 a	P o	A m	C h	A b	G o
6 6 6	1. 6	5	5	5	5	1
比較 1	1. 6	5	5	5	5	5
比較 2	1. 6	5	5	5	5	5

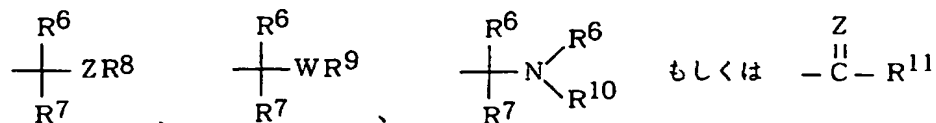
請求の範囲

1. 一般式 [1]



〔式中、Xは水素原子又はハロゲン原子を表し、Yは水素原子、ハロゲン原子、シアノ基、アルキル基、ハロアルキル基、アルコキシ基又はハロアルコキシ基を表し、R¹は水素原子、アルキル基、アミノ基又はハロアルキル基を表し、R²はアルキル基又はハロアルキル基を表し、R³は水素原子、ハロゲン原子、アルキル基又はハロアルキル基を表し、R⁴及びR⁵はそれぞれ同一又は相異なり、水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、アルケニルオキシ基、アルキニルオキシ基、アルコキシカルボニルアルコキシ基、アルキルチオ基、ハロアルキルチオ基、アルケニルチオ基、アルキニルチオ基、アルコキシカルボニルアルキルチオ基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていてもよいフェニルスルホニル基、ハロゲン原子、ヒドロキシイミノアルキル基、ヒドロキシイミノハロアルキル基、アルコキシイミノアルキル基、アルコキシイミノハロアルキル基、アルキルイミノアルキル基、置換されていてもよいフェニルイミノアルキル基、ヒドラゾノアルキル基、アルキルヒドラゾノアルキル基、置換されていてもよいフェニルヒドラゾノアルキル基、シアノ基、（窒素原子に、同一又は相異なる水素原子、アルキル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、もしくは置換されていてもよいフェニル基が置換した）カルバモイル基、置換されていてもよいフェニル基、置換されていてもよいベンジル基、シアノアルキル基、カルバモイルアルキル基、チオシアノアルキル基、ニトロ基、ヒドロキシアミノ基、アルキル基により置換されていてもよいオキシラニル基、（窒素原子に、同一又は相異なる水素原子、アルキル基、ハロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、シクロア

ルキル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、置換されていて
もよいフェニルスルホニル基、アシル基、ハロアルキルカルボニル基もしくは置
換されていてよいベンゾイル基が置換した) アミノ基又は一般式



(式中、Zは酸素原子又は硫黄原子を表し、Wは基-SO-又は基-SO₂-を表し、R⁶は水素原子又はアルキル基を表し、R⁷は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基又はアルキルチオアルキル基を表し、あるいはR⁶及びR⁷は互いに結合し、これらが結合している炭素原子と一緒に3～8員(炭素)環を形成することもある。R⁸は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基、ジアルキルカルバモイルアルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基、ハロアルキルカルボニル基、モノアルキルカルバモイル基、モノアルキルチオカルバモイル基、ジアルキルカルバモイル基、ジアルキルチオカルバモイル基又は置換されていてよいベンゾイル基を表し、R⁹は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、ハロアルキル基、アルコキシカルボニルアルキル基、ヒドロキシカルボニルアルキル基、モノアルキルカルバモイルアルキル基又はジアルキルカルバモイルアルキル基を表し、R¹⁰は水素原子、アルキル基、アシル基、アルキルスルホニル基、ハロアルキルスルホニル基又はハロアルキルカルボニル基を表し、R¹¹は水素原子、アルキル基、シクロアルキル基、アルケニル基、アルキニル基、ハロアルキル基、アルコキシアルキル基、アルキルチオアルキル基、置換されていてよいフェニル基、アルコキシ基、ハロアルコキシ基、置換されていてよいベンジルオキシ基、置換されていてよいフェノキシ基又は水酸基を表す。)で示される基を表す。)で示されるベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体。

2. 請求項1に記載のベンゾフラン-7-イルウラシル誘導体を有効成分とし

て含有する除草剤。

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP97/00320

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int. Cl⁶ C07D405/04, A01N43/54

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl⁶ C07D405/00-405/14, A01N43/48-43/62

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CAS ONLINE

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	WO, 95/05079, A (FMC Corp.), February 23, 1995 (23. 02. 95), Claim & AU, 9474806, A	1 - 2
A,P	US, 5521147, A (FMC Corp.), May 28, 1996 (28. 05. 96), Claim (Family: none)	1 - 2
A	JP, 5-25165, A (Sumitomo Chemical Co., Ltd.), February 2, 1993 (02. 02. 93), Claim & US, 5169431, A & EP, 476697, A1 & CA, 2051942, A	1 - 2
A	JP, 6-321941, A (Sumitomo Chemical Co., Ltd.), November 22, 1994 (22. 11. 94), Claim & US, 5411935, A & EP, 617033, A1 & CA, 2119047, A	1 - 2

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier document but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
April 24, 1997 (24. 04. 97)Date of mailing of the international search report
May 7, 1997 (07. 05. 97)Name and mailing address of the ISA/
Japanese Patent Office

Authorized officer

Facsimile No.

Telephone No.

国際調査報告

国際出願番号 PCT/JP97/00320

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl⁶ C07D405/04, A01N43/54

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl⁶ C07D405/00-405/14, A01N43/48-43/62

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

CAS ONLINE

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	WO, 95/05079, A (FMC Corporation), 特許請求の範囲, 23, 2月, 1995 (23.02.95) & AU, 9474806, A	1-2
A, P	US, 5521147, A (FMC Corporation), 特許請求の範囲, 28, 5月, 1996 (28.05.96) (ファミリーなし)	1-2
A	JP, 5-25165, A (住友化学工業株式会社), 特許請求の範囲, 2, 2月, 1993 (02.02.93) & US, 5169431, A & EP, 476697, A1 & CA, 2051942, A	1-2

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」 先行文献ではあるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

24.04.97

国際調査報告の発送日

07.05.97

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/JP)

郵便番号100

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

高原 慎太郎

4C

9053

電話番号 03-3581-1101 内線 3453

C (続き) . 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求の範囲の番号
A	J P, 6-321941, A (住友化学工業株式会社) , 特許請求の範囲, 22, 11月, 1994 (22. 11. 94) & US, 5411935, A & EP, 617033, A1 & CA, 2119047, A	1-2